



Restauration de la symétrie de parité intrinsèque dans les noyaux atomiques à partir d'approches de type champ moyen plus corrélations

V.N.H. Tran

► To cite this version:

V.N.H. Tran. Restauration de la symétrie de parité intrinsèque dans les noyaux atomiques à partir d'approches de type champ moyen plus corrélations. Astrophysique [astro-ph]. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2010. Français. NNT : . tel-00525318

HAL Id: tel-00525318

<https://theses.hal.science/tel-00525318>

Submitted on 11 Oct 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Numéro d'ordre: 4016
CENBG 2009/2010

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

Centre d'Études Nucléaires de Bordeaux-Gradignan

ÉCOLE DOCTORALE DE SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

DOMAINE DE RECHERCHE : Astrophysique, Plasmas, Corpuscules

Présentée par

M. Viet Nhan Hao TRAN

Restauration de la symétrie de parité intrinsèque dans les noyaux atomiques à partir d'approches de type champ moyen plus corrélations

Directeurs de thèse : **Philippe QUENTIN** et **HA Thuy Long**

Soutenue le 07 avril 2010

Devant la commission d'examen formée de:

M. BENDER	Directeur de recherches, CENBG Bordeaux	Président
H. GOUTTE	Ingénieur, GANIL Caen	Rapporteur
T. L. HA	Maître de Conférences, UNV Hanoï	Examineur
J. LIBERT	Chargé de Recherches, IPN Orsay	Examineur
F. NOWACKI	Chargé de Recherches, IPHC Strasbourg	Rapporteur
P. QUENTIN	Professeur, CENBG Bordeaux	Examineur

A mes parents, à ma femme Ngoc Anh

Remerciements

Je souhaite témoigner toute ma reconnaissance envers Philippe QUENTIN pour son aide constante et efficace qui m’a aidé à passer les difficultés rencontrées tout au long de mon travail. Sans lui, ce travail n’aurait jamais vu le jour. Je suis touché par ses sentiments non seulement pour moi mais aussi pour les autres jeunes étudiants vietnamiens qui veulent choisir la recherche comme métier.

Ce travail doit beaucoup à HA Thuy Long, non seulement pour m’avoir initié à la physique, aux calculs avec le langage Fortran et au code HTDA, mais surtout pour ses conseils précieux pour un débutant dans la recherche.

J’adresse tous mes remerciements à Ludovic BONNEAU pour ses conseils et ses encouragements durant les périodes difficiles traversées durant ces trois années.

Je remercie Michaël BENDER qui a accepté d’être le président du jury. De façon moins formelle je souhaite vivement lui remercier pour les discussions toujours riches et chaleureuses chaque fois j’ai frappé à sa porte.

Je remercie bien évidemment, Héloïse GOUTTE et Frédéric NOWACKI, pour avoir accepté d’être les rapporteurs de ma thèse, et Jean LIBERT d’avoir été membre du jury. Je les remercie pour leur soutien dans l’écriture de ce mémoire et leur travail très sérieux sur mon manuscrit.

Je n’oublierais jamais mes amis du CENBG : Jérémie (grand diable), Lucas (Dieu) et Damien (petit diable), Rémi, Houda et Julien notamment nos discussions sur le sport, les films et sur divers problèmes de société.

Pour finir, je pense à mes parents et à ma femme...

Table des matières

Introduction générale	1
1 Champ moyen	5
1.1 Champ moyen microscopique	5
1.2 Méthode Hartree-Fock	7
1.2.1 Déterminant de Slater	8
1.2.2 Principe variationnel	9
1.2.3 Matrice densité à un corps	10
1.2.4 Equations de Hartree-Fock	11
1.2.5 Choix de l'interaction	13
1.2.6 Interaction de Skyrme	15
1.2.7 Fonctionnelle énergie	17
1.2.8 Hamiltonien de Hartree-Fock \hat{h}	19
1.2.9 Calcul Hartree-Fock sous contrainte	20
1.2.10 Calculs Hartree-Fock brisant la parité	21
1.3 Corrélations d'appariement	24
1.3.1 Insuffisance de la méthode Hartree-Fock	24
1.3.2 Approximation de Bardeen-Cooper-Schriffer (BCS)	26
1.4 Méthode HTDA	29
1.4.1 Principe général de la méthode HTDA	30
1.4.2 Formalisme HTDA	31
1.4.3 Interaction δ	33
1.4.4 Construction de la base $ nph\rangle$	34
1.4.5 Troncature de la base à N corps	35
1.4.6 Calcul des éléments de matrice	37
1.4.7 Méthode du vide relatif	38
1.4.8 Diagonalisation	42
1.4.9 Mesure de la diffusivité de la surface de Fermi	43
1.4.10 Calcul auto-cohérent	44
2 Mélange de configuration	47
2.1 Introduction	47
2.2 Théorème de Löwdin	47
2.2.1 Méthode des mineurs	48
2.2.2 Matrice densité mixte	50
2.3 Application du théorème de Löwdin	52

2.3.1	Bases bi-orthogonales	52
2.3.2	Généralisation de la méthode du vide relatif	54
2.4	Matrice densité mixte en coordonnées spatiales	65
3	Restauration de la symétrie de parité	69
3.1	Introduction	69
3.2	Modèle simplifié	72
3.3	Energie non projetée $\langle \Psi \hat{H} \Psi \rangle$	80
3.3.1	Eléments de matrice diagonaux	80
3.3.2	Eléments de matrice non-diagonaux	80
3.4	Recouvrement $\langle \Psi \tilde{\Psi} \rangle$	81
3.5	Eléments de matrice $\langle \Psi \hat{H} \tilde{\Psi} \rangle$	83
3.5.1	Eléments de matrice $\langle \Phi_0 \hat{H} \tilde{\Phi}_0 \rangle$	83
3.5.2	Eléments de matrice $\langle \Phi_0 \hat{\delta} \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$	86
3.5.3	Eléments de matrice $\langle \Phi_2^{(k)} \hat{\delta} \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle (k \neq l)$	87
3.5.4	Eléments de matrice $\langle \Phi_2^{(k)} \hat{H} \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$	89
4	Applications et Résultats	93
4.1	Introduction	93
4.2	Aspects numériques	95
4.3	Etat fondamental du noyau ^{194}Pb	96
4.3.1	Calculs HTDA non-projeté	96
4.3.2	Calculs de projection	97
4.3.3	Conclusions	100
4.4	Etat superdéformé de ^{194}Pb ($^{194}\text{PbSD}$)	101
4.4.1	Calculs HTDA non-projeté	101
4.4.2	Calculs de projection	102
4.5	Etat fondamental de ^{222}Ra	102
4.5.1	Calculs HTDA	105
4.6	Seconde barrière de fission du ^{240}Pu	105
4.6.1	Calculs HTDA	108
	Conclusions-Perspectives	111
A	Base de l'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A.)	115
A.1	Définition	115
A.2	Etats individuels Hartree-Fock	117
B	Opérateur de parité	119
B.1	Définition	119
B.2	Propriétés de l'opérateur parité	119

C	Opérateur de renversement du sens du temps	123
C.1	Définition	123
C.2	Configurations paires par renversement du sens du temps	124
C.3	Simplification apportée par le caractère pair par rapport au renversement du sens du temps de nos solutions	124

Introduction générale

Les méthodes de champ moyen microscopique incluant un traitement des corrélations fournissent dans leurs versions les plus modernes une excellente description de la structure de la plupart des noyaux connus expérimentalement (cf. par exemple pour les noyaux pair-pairs[1]). Une première approche est celle du modèle en couches qui utilise un potentiel extérieur simple comme champ moyen mais qui inclut de façon excellente des corrélations. Le hamiltonien est diagonalisé d'après ce modèle dans une base de déterminants de Slater en considérant toutes les excitations particules-trous possibles à l'intérieur d'un espace de configuration à un corps donné. Le modèle en couches est souvent lourd à mettre en œuvre à cause de la taille énorme des matrices à diagonaliser malgré l'espace de diagonalisation fortement tronqué. Il permet de décrire les premiers états excités des noyaux avec leur spin et leur parité.

Une autre approche utilise un meilleur champ moyen qui est dérivé microscopiquement à partir d'une interaction effective entre les nucléons par une procédure auto-cohérente Hartree-Fock. Cette approche, comme il est bien connu, peut conduire à des solutions brisant certaines symétries dynamiques (rotation, translation). Les corrélations sont usuellement incluses au delà de l'approximation simple de Hartree-Fock par des méthodes qui engendrent une brisure de symétries de la solution (violation de l'invariance de jauge du groupe de symétrie $U(1)$ associée à la conservation du nombre de particule dans la théorie Hartree-Fock-Bogoliubov ou HF+BCS). Ceci permet d'inclure les corrélations d'appariement responsables d'une phase superfluide dans les noyaux. L'état du système n'est alors pas simplement un état de particules indépendantes mais un état de quasi-particules indépendantes qui n'est pas état propre de l'opérateur nombre de particules. Les techniques de restauration (comme les méthodes de projection) approchées sont insuffisantes pour décrire les situations de faible appariement[2]. Ces calculs qui ont une très grande versatilité, sont plutôt bien adaptés pour décrire les états fondamentaux des noyaux pair-pairs voir impairs ou impair-impairs et constituent une bonne base pour des calculs ultérieurs d'états excités.

On constate que les deux méthodes utilisent une procédure commune en deux étapes : définition d'un champ moyen de référence puis introduction de corrélations. Le groupe de Bordeaux a développé depuis 10 ans une approche intermédiaire utilisant des interactions effectives nucléon-nucléon phénoménologiques du type de l'interaction de Skyrme, par exemple, en traitant les corrélations de façon praticable et conservant le nombre de particules qu'on appelle méthode HTDA (pour Higher Tamm-Dancoff Approximation). Cette méthode revient à chaque étape du processus itératif auto-cohérent à effectuer un calcul de modèle en couches très tronqué mais plutôt bien convergé dans la série de développement particule-trou dans la mesure où on utilise les états à un corps d'un Hamiltonien Hartree-Fock déduit d'une matrice densité à un

corps incluant l'effet des corrélations. Ce travail a fait l'objet de la thèse de doctorat de Nathalie PILLET en 2000 [3] pour étudier l'état fondamental 0^+ et l'état isomérique 16^+ du noyau pair-pair du ^{178}Hf en imposant la symétrie axiale, par Thuy Long HA en 2004 [4] pour étudier l'état fondamental et les états isomériques auto-cohérent de noyaux pair-impairs ou impair-impairs autour de la région de noyaux voisine du noyau étudié par Nathalie PILLET, par Kamila SIEJA en 2007 [5] pour étudier les corrélations neutron-proton $N \sim Z$ de noyaux de la région $A \sim 64$, par Houda NAÏDJA en 2009 [6] pour introduire de corrélations vibrationnelles pour le noyau doublement magique et sphérique ^{40}Ca . Il est à noter que le mélange d'isospin dans cette approche est actuellement étudié par L. Bonneau, J. Le Bloas et P. Quentin en collaboration avec J. Bartel et D. Strottman [44] (il est clair que pour ce genre d'études la conservation du nombre de particules est indispensable).

L'imposition de la symétrie axiale et celle de réflexion droite-gauche dans les travaux pionniers précédents est évidemment adaptée au traitement des noyaux ne manifestant pas de triaxialité ou de déformation octupolaire. Il apparaît néanmoins que l'introduction de l'asymétrie de réflexion droite-gauche est importante pour décrire certains phénomènes. Par exemple, dans la région des actinides la présence à basse énergie de niveaux $K^\pi = 1^-$ a été depuis longtemps interprétée comme une excitation de modes octupolaires de vibration d'un noyau à déformation symétrique (quadrupolaire) à l'équilibre. Ce type de déformation combiné avec la déformation quadrupolaire joue un rôle dans la description de certains systèmes nucléaires soit très déformables soit même déformés octupolairement dans l'état fondamental. C'est le cas dans des états superdéformés ou aux environs du seconde barrière de fission (et au-delà). Dans cette thèse, et à titre d'exemple nous allons étudier l'état fondamental du ^{194}Pb , l'état superdéformé de ce même noyau, l'état fondamental du ^{222}Ra et le ^{240}Pu au voisinage de la seconde barrière de fission qui sont des systèmes où on sait depuis un certain temps que le mode de déformation octupolaire joue un rôle important.

Pour introduire le degré de liberté octupolaire dans l'approche HTDA, nous avons tout d'abord brisé la symétrie de réflexion droite-gauche qui était précédemment imposée dans le code HTDA. En conséquence, les fonctions d'ondes individuelles perdent leurs parités bien définies. Une restauration de cette symétrie est effectuée par projection. Cela conduit à un mélange de deux configurations. Cette projection constitue donc en fait un cas simple de mélange de configurations. En conséquence, on peut considérer ce travail comme un prototype pour l'étude d'autres restaurations de symétrie plus compliquées comme celle contenant la symétrie de rotation ou le traitement de corrélations correspondant à des mouvements collectifs de grande amplitude utilisant la Méthode de la Coordonnée Génératrice (GCM). Dans le premier chapitre nous effectuerons une présentation théorique des approximations Hartree-Fock et HTDA points de départ de notre travail. Les outils pour le mélange de configurations seront présentés dans le chapitre 2 qui fournira la base pour la construction d'un modèle simplifié

pour restaurer la symétrie présenté dans le chapitre 3. Les résultats obtenus sont discutés dans le chapitre 4.

CHAPITRE 1

Champ moyen

1.1 Champ moyen microscopique

Pour décrire la structure d'un noyau supposé isolé nous utilisons une méthode microscopique reposant sur les hypothèses fondamentales suivantes :

- + Le noyau atomique est un système quantique à N corps (N fermions : les nucléons) ;
- + Les nucléons sont des objets ponctuels et sans structure ;
- + L'énergie cinétique des nucléons dans l'état fondamental du noyau ou dans des états peu excités est supposée non relativiste ;
- + Les nucléons interagissent principalement par une interaction à deux corps.
- + L'équation du mouvement donnant la fonction d'onde Ψ du système donc un état stationnaire est l'équation non relativiste de Schrödinger :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1.1)$$

où l'Hamiltonien \hat{H} du système est composé de l'opérateur énergie cinétique \hat{K} et d'une **interaction à deux corps** \hat{V} :

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \quad (1.2)$$

Une méthode microscopique exacte permettant de traiter le problème à N corps dans le noyau n'est pas encore disponible pour N dépassant quelques unités. On doit donc faire des approximations. Nous empruntons une approche microscopique approchée non relativiste de physique atomique qui est appelée l'approximation de Hartree-Fock . Cette méthode de dérivation du champ moyen permet de décrire les caractéristiques de l'état fondamental des noyaux à travers toute la table périodique.

Tout d'abord nous allons décrire brièvement les principes de l'approche de champ moyen ou approximation de particules indépendantes que l'approximation de Hartree-Fock prend comme le point départ.

Historiquement, l'un des premiers modèles du noyau, proposé par Weizsäcker en 1935 [9], est celui de la goutte liquide où le noyau est assimilé à un fluide classique constitué de nucléons qui sont confinés dans un volume fini de l'espace par l'interaction forte. Ce modèle joua un rôle très important : il permit de reproduire les masses atomiques avec une assez bonne précision. Cependant, le modèle de la goutte liquide est entièrement macroscopique. Par ailleurs, l'existence du principe de Pauli invalide partiellement cette comparaison du noyau avec une goutte liquide ordinaire pour le transformer en fluide quantique. En interdisant la diffusion d'une particule dans un état déjà occupé, ce principe conduit à un libre parcours moyen du nucléon (en moyenne 15 fm pour un nucléon dans le noyau d'après par exemple G. Bertsch [10]) très supérieur à la distance caractéristique inter-nucléonique. Il est de l'ordre des dimensions du noyau. La matière nucléaire peut alors être décrite de façon approchée comme un gaz confiné de particules non-interagissantes.

La co-existence de ces deux types de propriétés de fluide (classique et quantique) souligne le caractère intermédiaire (« mésoscopique ») des noyaux atomiques.

Cet autre aspect du noyau où les nucléons sont considérés comme des particules indépendantes rend naturelle l'existence d'un potentiel moyen dans lequel évoluent les nucléons. Les manifestations expérimentales de l'existence d'un champ moyen appelées effets de couches, semblables à celles rencontrées en physique atomique, sont bien connues. Le problème qui se pose alors en physique nucléaire est la définition de ce potentiel moyen qui a la particularité ici d'être produit par les nucléons eux-mêmes (à la différence de la physique atomique où les électrons sont confinés par le champ coulombien créé par le noyau). Pour simuler le champ moyen du noyau, de nombreux potentiels phénoménologiques ont été proposés dont les plus connus sont :

- + le potentiel d'oscillateur harmonique modifié dû à Nilsson [11] qui contient un terme spin-orbite $\mathbf{l.s}$ qui permet de reproduire les bons nombres magiques et un terme en \mathbf{l}^2 qui tient compte du fait que les nucléons proches de la surface sentent un potentiel plus faible que celui correspondant à l'oscillateur harmonique simple.

- + le potentiel de Wood-Saxon [12] modélisant la partie Hartree du champ moyen microscopique dont la généralisation au cas des noyaux déformés a pour expression en coordonnées sphériques :

$$V_{\text{ws}}(r, \theta, \varphi) = - \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R(\theta, \varphi)}{a}\right)} \quad (1.3)$$

Avec ces potentiels les nombres magiques ne sont pas reproduits, sauf les 3 premiers (2,8,20). Il était donc clair vers les années 40 qu'un potentiel central n'arriverait pas à reproduire tous les nombres magiques. La percée cruciale vint en 1949 quand Goeppert-Mayer et Jensen ont

suggéré d'ajouter un potentiel spin-orbite :

$$V_{\text{so}} \sim \frac{1}{r} \frac{dV_{\text{WS}}(r)}{dr} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \quad (1.4)$$

qui a permis d'expliquer tous les nombres magiques connus.

Ces potentiels phénoménologiques peuvent être utilisés pour calculer les fonctions d'ondes individuelles et l'énergie. Cependant, avec le progrès des ordinateurs les années de 50 à 80 du siècle dernier, un tel champ moyen auto-cohérent à un corps a pu être dérivé à partir d'une force microscopique effective à deux corps (l'interaction nucléon-nucléon) par le principe variationnel appliqué dans le cadre de l'approximation de champ moyen. On verra dans ce qui suit (méthode Hartree-Fock) que les deux potentiels phénoménologiques mentionnés ci-dessus sont souvent utilisés comme le point départ dans un processus auto-cohérent pour extraire ce champ. En effet, contrairement aux approches phénoménologiques du modèle en couches où le champ moyen est directement postulé sous forme paramétrisée, cette théorie se propose de le dériver à partir des interactions élémentaires entre les nucléons. L'ingrédient de base est l'hamiltonien microscopique qui gouverne la dynamique des nucléons individuels :

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \quad (1.5)$$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \hat{v}_{ij} \quad (1.6)$$

où m est la masse du nucléon et le terme d'interaction est construit avec **la force effective** \hat{v} entre les N nucléons.

1.2 Méthode Hartree-Fock

L'approximation de Hartree-Fock a été développée pour la première fois par Hartree en 1928 [13], pour décrire de façon plus précise la structure électronique des atomes, en tenant compte de l'interaction électrostatique à deux corps entre les électrons. Mais dans son évaluation Hartree n'a pas inclus les effets du principe de Pauli. Fock les a introduit en 1930 [14] par l'antisymétrisation de l'approche de Hartree. Bien que le noyau ait beaucoup de caractères similaires avec ceux d'un atome, les nucléons sont différents en particulier en ce qu'ils sont uniquement liés par leurs interactions mutuelles. Au contraire des électrons, ils ne se déplacent pas dans un champ central. L'application directe au noyau de la théorie à N corps créée pour la physique atomique pose encore beaucoup de problèmes parce que le traitement des nucléons présente des difficultés propres comme : l'interaction nucléon-nucléon n'est pas connue analytiquement, cette interaction a un cœur dur... Néanmoins, l'approximation de Hartree-Fock appliquée pour la première fois en physique nucléaire par Kelson en 1963 [15] a conduit à de grands succès.

Basée sur l'approche de champ moyen, l'approximation Hartree-Fock nécessite de prendre en compte le fait que tous les nucléons participent à ce champ. Il n'y a pas de cœur inerte. L'hypothèse centrale consiste à adopter un déterminant de Slater $|\Phi\rangle$ pour la fonction d'onde de l'état fondamental d'un noyau ayant N nucléons.

1.2.1 Déterminant de Slater

Dans l'approximation de particules indépendantes ou approximation de Hartree-Fock, l'adjectif *indépendantes* doit être pris au sens des probabilités indépendantes, c'est-à-dire où les probabilités pour N particules sont factorisées en produits de N probabilités pour chacune des particules. L'état du système $|\Phi\rangle$ à N particules, qui ne tient pas compte du principe de Pauli, peut donc être approché par un produit direct de N états de particules individuelles $|\phi_i\rangle$ supposés orthonormalisés :

$$|\Phi\rangle = |\phi_1\rangle|\phi_2\rangle|\phi_2\rangle \dots |\phi_N\rangle \quad (1.7)$$

Puisque les nucléons sont des particules fermioniques, l'état du système doit être antisymétrique pour vérifier le principe de Pauli. Il faut donc antisymétriser l'état non-physique $|\Phi\rangle$ pour avoir un état physique $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ par l'action de l'opérateur d'antisymétrisation $\hat{\mathcal{A}}$ sur $|\Phi\rangle$:

$$|\Phi_{\text{HF}}\rangle = \sqrt{N!}\hat{\mathcal{A}}|\Phi\rangle \quad (1.8)$$

où $\sqrt{N!}$ est un facteur de normalisation (état $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ normalisé à 1) et l'anti-symétriseur $\hat{\mathcal{A}}$ est tel que :

$$\hat{\mathcal{A}} = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^p \hat{P} \quad (1.9)$$

avec \hat{P} opérateur de permutation et p un nombre de transpositions dont le produit est équivalent à P . La fonction d'onde de l'état fondamental d'un noyau ayant N nucléons dans l'état $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ est un déterminant de Slater Φ_{HF} qui n'impose que les corrélations apportées par le principe de Pauli :

$$\Phi_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \phi_1(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_1(\mathbf{r}_N) \\ \phi_2(\mathbf{r}_1) & \phi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_2(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\mathbf{r}_1) & \phi_N(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (1.10)$$

($\phi_i(\mathbf{r}_j)$ est la fonction d'onde d'une particule j dans un état à un corps i). Toutes les autres corrélations entre nucléons vont être négligées dans Φ_{HF} . A la permutation des coordonnées d'espace et de spin de deux nucléons correspond la permutation des deux lignes correspondantes du déterminant. Ces déterminants de Slater satisfont le principe d'antisymétrie. En effet un déterminant est antisymétrique sous permutation de ses lignes ou de ses colonnes. Cette propriété est également valable pour une combinaison linéaire de déterminants. Pour

simplifier l'écriture, nous utiliserons maintenant la notation $|\Phi\rangle$ au lieu de $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ pour décrire un déterminant de Slater.

Finalement, le déterminant de Slater s'écrit en seconde quantification :

$$|\Phi_N\rangle = \prod_{i=1}^N a_i^\dagger |0\rangle \quad (1.11)$$

où l'opérateur a_i^\dagger crée la fonction d'onde individuelle ϕ_i à partir du vide de particule $|0\rangle$.

Le déterminant de Slater $|\Phi\rangle$ est la traduction mathématique de l'hypothèse du modèle à particules indépendantes, tenant compte des corrélations liées au principe de Pauli. Il reste à déterminer les fonctions d'onde individuelles de chaque nucléon $|\phi_i\rangle$ intervenant dans ce déterminant, de même que le potentiel à un corps dérivé à partir de l'interaction effective à deux corps \hat{V} . Pour cela, le déterminant de Slater doit être tel que l'énergie du système soit minimale. A cet effet, on applique un principe variationnel de Ritz approché.

1.2.2 Principe variationnel

Principe variationnel de Ritz

Considérons un système à N corps caractérisé par son hamiltonien \hat{H} et une de ses solutions propres $|\Phi\rangle$ normée qui vérifie l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\hat{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \quad (1.12)$$

Le principe variationnel de Ritz stipule qu'il existe une équivalence entre la résolution de l'équation de Schrödinger ci-dessus et la minimisation de la fonctionnelle énergie $E[\Phi]$ définie par :

$$E[\Phi] = \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (1.13)$$

c'est-à-dire :

$$\hat{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \iff \delta E[\Phi] = 0 \quad (1.14)$$

Autrement dit : *Toute fonction d'onde de norme non nulle qui rend extrémale $E[\Phi]$ est fonction propre de \hat{H} avec $E[\Phi]$ pour valeur propre, et réciproquement.*

Principe variationnel approché

Ces deux propositions équivalentes sont très difficiles à manier dans la pratique, si on les applique exactement parce que en principe par exemple dans le cas variationnel il faut tester tout l'espace des états physiques du système à N particules considéré. C'est pourquoi on va se limiter pour le calcul variationnel à un sous ensemble des états physiques, d'expression

mathématique plus ou moins simple : ce sont les états d'essai. Si la vraie solution n'est pas dans le sous ensemble des états d'essai, la solution extrémale n'est pas un état propre exact, mais seulement une approximation.

La méthode de Hartree-Fock consiste en une méthode variationnelle qui est approchée parce qu'elle n'est appliquée qu'au sous-ensemble de l'espace de Hilbert des déterminants de Slater. Malheureusement, la somme de deux déterminants de Slater n'est pas en général un déterminant de Slater. Le problème cesse d'être linéaire. Une méthode variationnelle approchée par restriction de l'ensemble variationnel est adaptée à la recherche de l'état fondamental exact d'énergie E_0 puisque pour tout état d'essai $|\Phi\rangle$ on peut montrer que :

$$E[\Phi] \geq E_0 \quad (1.15)$$

Une autre façon d'exprimer la théorie de Hartree-Fock est fondée sur la considération du fait que l'énergie de l'état fondamental est approchée par une fonctionnelle de la matrice densité à un corps.

1.2.3 Matrice densité à un corps

Considérons un système de N particules identiques de coordonnées respectives $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ placées dans le potentiel créé par elles-même. Chaque coordonnée \mathbf{x}_i est une combinaison de la coordonnée de l'espace \mathbf{r}_i de la coordonnée de spin s_i et de la coordonnée d'isospin. Supposons que le système soit représenté par une fonction d'onde Φ qui satisfait la condition d'antisymétrisation :

$$\hat{P}\Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = (-)^p \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (1.16)$$

où \hat{P} est l'opérateur de permutation de parité $(-)^p$. Notons dans ce qui suit :

$$\int (d\mathbf{x}) = d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N \quad (1.17)$$

Le symbole $\int (d\mathbf{x})$ veut dire que l'on effectue une intégrale de toutes les coordonnées, et $\int (d\mathbf{x}_i)$ l'intégrale sur tous les variables sauf \mathbf{x}_i .

Les éléments de la matrice densité à un corps sont définis par :

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = N \int d(\mathbf{x}_1) \Phi^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_N) \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (1.18)$$

On peut montrer que cette densité nous permet de calculer simplement la valeur moyenne d'une observable à un corps :

$$\langle A^{(1)} \rangle = \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' A^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \text{Tr}(A^{(1)} \rho) = \text{Tr}(\rho A^{(1)}) \quad (1.19)$$

On dit que ρ contient toute l'information à un corps du système. Dans le cas d'un déterminant de Slater $|\Phi\rangle$ où les fonctions d'ondes individuelles sont orthonormalisées, la matrice densité est :

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_i^N \phi_i^*(\mathbf{x}') \phi_i(\mathbf{x}) \quad (1.20)$$

C'est donc l'élément de matrice du projecteur sur le sous-espace à une particule sous-tendu par les états occupés du déterminant de Slater considéré :

$$\hat{\rho} = \sum_i^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (1.21)$$

Il est très pratique d'utiliser la forme de matrice densité associée au déterminant de Slater en seconde quantification (1.11) pour décrire le formalisme de l'approche Hartree-Fock :

$$\rho_{ij} = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle = \langle \Phi | a_j^\dagger a_i | \Phi \rangle \quad (1.22)$$

où a_j^\dagger et a_i sont respectivement l'opérateur de création d'un fermion dans l'état à 1 corps $|j\rangle$ et l'opérateur d'annihilation d'un fermion dans l'état $|i\rangle$.

La donnée de la matrice $\hat{\rho}$ définit complètement le déterminant de Slater du système. Pour trouver la solution, on va écrire le problème variationnel approché de Hartree-Fock sous la forme de l'annulation de la dérivée fonctionnelle de l'énergie par rapport à $\hat{\rho}$. Tout d'abord, nous allons calculer les éléments de matrice du Hamiltonien microscopique effectif (1.6) dans l'état $|\Phi\rangle$ en fonction de la densité $\hat{\rho}$.

1.2.4 Equations de Hartree-Fock

On peut réécrire l'Hamiltonien effectif (1.6) en seconde quantification :

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle i | \hat{k} | j \rangle a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (1.23)$$

où la somme porte sur tout le spectre des états individuels i, j, k, l (dans ce qui suit on notera l'élément de matrice à 2 corps antisymétrisé $\langle ij | \hat{v} | \tilde{k}l \rangle$ par \tilde{v}_{ijkl}). La valeur moyenne de l'Hamiltonien \hat{H} dans l'état $|\Phi\rangle$:

$$E = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle \quad (1.24)$$

peut être exprimée en utilisant le théorème de Wick en fonction de la matrice densité $\hat{\rho}$ sous la forme :

$$E[\hat{\rho}] = \sum_{ij} k_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \rho_{ki} \tilde{v}_{ijkl} \rho_{lj} \quad (1.25)$$

En utilisant les notations usuelles d'une trace et d'une double trace, on peut réécrire les deux termes (1.25) de la façon suivante :

$$E[\hat{\rho}] = \text{Tr}(k\rho) + \frac{1}{2}\text{TrTr}(\rho\tilde{v}\rho) \quad (1.26)$$

Pour assurer, pendant la variation de l'énergie E , deux propriétés de la matrice densité ($\rho^2 = \rho$, $\text{Tr}\rho = N$) valables pour un déterminant de Slater ayant N particules, on doit contraindre tous les éléments de matrice de $\rho^2 - \rho$ à rester nuls et la trace de ρ à rester constante. On introduira donc pour chaque élément de matrice $(\rho^2 - \rho)_{ij}$ un multiplicateur de Lagrange noté Λ_{ij} et on appellera λ le multiplicateur de Lagrange associé à $\text{Tr}\rho$. Ainsi le problème variationnel s'écrira :

$$\frac{\delta E'[\hat{\rho}]}{\delta \hat{\rho}} = \frac{\delta}{\delta \rho} \left[\text{Tr}(k\rho) + \frac{1}{2}\text{TrTr}\rho\tilde{v}\rho - \text{Tr}(\Lambda(\rho^2 - \rho)) - \lambda\text{Tr}\rho \right] \quad (1.27)$$

La dérivée fonctionnelle de $E[\hat{\rho}]$ s'exprime sous la forme :

$$\left[\frac{\delta E'[\hat{\rho}]}{\delta \hat{\rho}} \right]^T = k + \text{Tr}(\rho\tilde{v}) - (\Lambda\rho + \rho\Lambda) + \Lambda - \lambda \quad (1.28)$$

où T dénote la transposition de cette dérivée fonctionnelle et $\text{Tr}(\rho\tilde{v})$ est la réduction à un corps pour $\hat{\rho}$ de l'opérateur à deux corps \tilde{v} . C'est un opérateur à un corps appelé champ moyen Hartree-Fock \hat{u}_{HF} qui dépend de la densité du système. On dit qu'il est auto-cohérent. C'est le champ moyen dans lequel "baignent" les nucléons. Il se comporte comme un potentiel extérieur pour chacun des nucléons et simule en moyenne toutes les interactions d'un nucléon avec les autres nucléons du noyau. Les éléments de matrice de \hat{u}_{HF} pour des états à un corps orthonormalisés quelconques $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_j\rangle$ sont donnés par :

$$\langle \psi_i | \hat{u}_{\text{HF}} | \psi_j \rangle = \sum_{k,l \text{ occupés } |\Phi\rangle} \langle \phi_k | \hat{\rho} | \phi_l \rangle \langle \psi_i \phi_l | \hat{v} | \widetilde{\psi_j \phi_k} \rangle \quad (1.29)$$

Dans la base canonique, où $\hat{\rho}$ est diagonale ($\rho_{kl} = \delta_{kl}$), on a

$$\langle \psi_i | \hat{u}_{\text{HF}} | \psi_j \rangle = \sum_{k \text{ occupés } |\Phi\rangle} \langle \psi_i \phi_k | \hat{v} | \widetilde{\psi_j \phi_k} \rangle \quad (1.30)$$

L'opérateur Hamiltonien à un corps de la particule i est défini par :

$$\hat{h}(i) = \hat{k}(i) + \hat{u}_{\text{HF}}(i) \quad (1.31)$$

L'opérateur Hamiltonien de Hartree-Fock qui agit dans l'espace de Hilbert à N particules s'écrit :

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) = \hat{K} + \hat{U}_{\text{HF}} \quad (1.32)$$

On peut donc réécrire l'équation (1.28) pour obtenir la relation variationnelle comme :

$$\hat{h} - (\Lambda\hat{\rho} + \hat{\rho}\Lambda) + \Lambda - \lambda = 0 \quad (1.33)$$

En utilisant la caractère d'idempotence de ρ on trouve la forme de Liouville des équations de Hartree-Fock :

$$[\hat{h}, \hat{\rho}] = 0 \quad (1.34)$$

Ceci signifie que pour la solution Hartree-Fock il existe une base d'états propres communs au Hamiltonien de Hartree-Fock et à l'opérateur matrice densité. Les états propres du projecteur $\hat{\rho}$ sont des états occupés (de valeur propre 1) et des états inoccupés (de valeur propres 0). Pour définir la solution Hartree-Fock on prendra donc les états occupés de ρ .

Notons par $|\phi_i\rangle$ les états de cette base, on aura un système d'équations :

$$\hat{h}|\phi_i\rangle = e_i|\phi_i\rangle \quad (1.35)$$

Donc avec l'approximation de Hartree-Fock on ne résoud pas l'équation de Schrödinger (1.1) mais on résoud des équations de Schrödinger pour des fonctions d'ondes individuelles. On voit que les équations Hartree-Fock ne sont pas linéaires, contrairement à l'équation de Schrödinger puisque \hat{h} dépend de $\hat{\rho}$. Cette non linéarité complique la résolution pratique ces équations. C'est un des prix à payer pour la simplification opérée.

En pratique on résoud les équations Hartree-Fock de façon itérative (cf. Figure 1.1). On choisit un point départ physiquement raisonnable, par exemple, en faisant une approximation sur le potentiel confinant supposé être le résultat des interactions attractives à deux corps. Ce potentiel (potentiel de Wood-Saxon dans notre cas) permet de calculer par diagonalisation un ensemble de vecteurs propres qui permettent à leur tour de calculer le champ moyen Hartree-Fock correspondant à l'interaction effective. Ce nouveau champ, après diagonalisation, fournit alors un autre ensemble de vecteurs propres qui vont servir à la construction d'un autre champ Hartree-Fock . . . et ainsi de suite. Une telle procédure est poursuivie jusqu'à ce qu'on obtienne la convergence, lorsque par exemple la différence des énergies entre deux itérations est inférieure à une certaine valeur.

1.2.5 Choix de l'interaction

L'approximation de Hartree-Fock a permis de réduire le problème de plusieurs corps en interaction, à une description de particules non interactives dans un champ moyen à un corps auto-cohérent. Cependant, l'approximation Hartree-Fock dans les noyaux n'est valable en pratique qu'avec une interaction effective dépendant de la densité. Nous ne pouvons pas déduire à partir des premiers principes dans une approche non relativiste la force par l'intermédiaire de laquelle les nucléons interagissent. Les expériences de diffusion nucléon-nucléon ainsi que

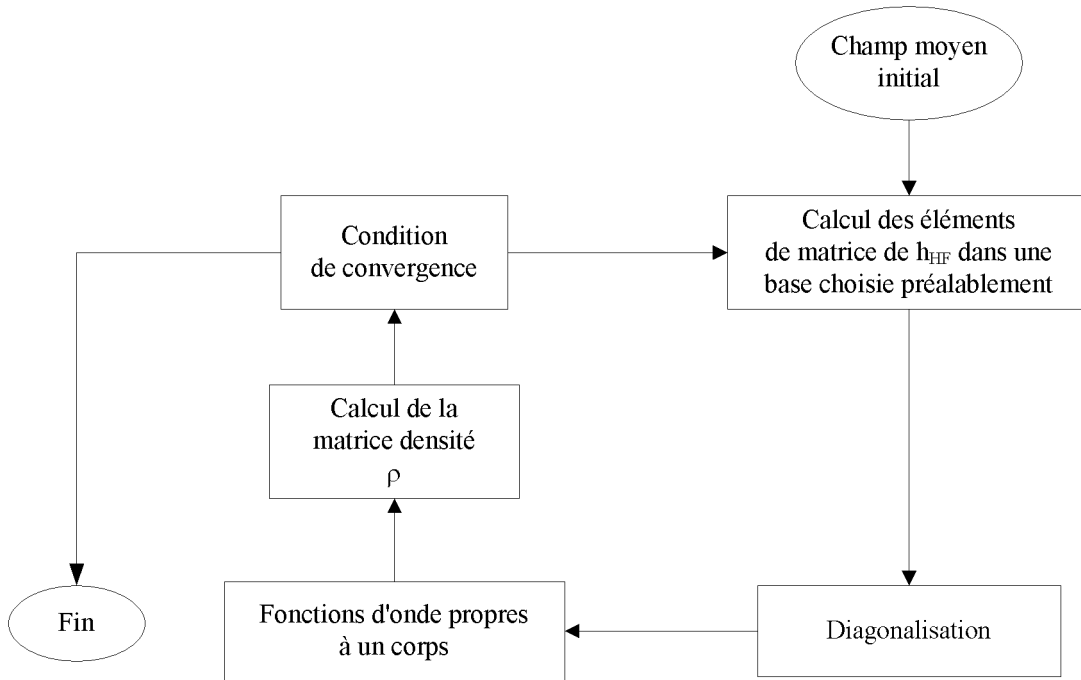


FIGURE 1.1 – La résolution des équations de Hartree-Fock

les propriétés du système que constitue le deutéron permettent d'obtenir des contraintes sur cette interaction et un certain nombre de propriétés d'invariance. A partir de là, de nombreuses formes de potentiel d'interaction nucléon-nucléon ont été proposées; citons par exemple les potentiels de Reid, d'Hamada-Johnston, de Paris ou encore de Bonn (cf. par exemple [16]). Si l'on veut construire une interaction nucléon-nucléon (N-N) effective dans le noyau à partir ce que nous savons de l'interaction N-N libre (la force nue), on se heurte à un certain nombre de difficultés, dont le plus problématique est le cœur dur (traduit par un potentiel infini lorsque la distance entre deux nucléons est inférieure à $r_c \sim 0.5 fm$). La présence d'un cœur dur dans l'interaction nue entre nucléons fait diverger le champ moyen Hartree-Fock .

En 1955, Brueckner [17] a proposé une approximation qui permet de dériver à partir de la force nue une force effective (appelée matrice G) entre deux nucléons dans la matière nucléaire, dépendant de la densité du milieu. Pour traiter les systèmes finis que sont les noyaux, Brueckner *et al* [18] ont utilisé la matrice G dans le cadre de l'approximation de la densité locale qui suppose que l'interaction nucléaire entre deux nucléons du noyau est égale à leur interaction effective dans la matière nucléaire pour une valeur de la densité égale à celle rencontrée dans la région d'interaction des deux nucléons. Il a montré que la théorie Hartree-Fock doit être appliquée non pas avec l'interaction nue puisqu'il faut tenir compte de certains termes d'ordre supérieur du développement perturbatif et que de toute façon ce champ diverge, mais avec une interaction effective dépendant de la densité calculée dans cette approche, qui nous débarrasse en outre du problème du cœur dur. Cependant, les calculs effectués à l'aide de cette théorie

sont très lourds et même impossibles dans l'état actuel pour des noyaux lourds, déformés et/ou loin de la vallée de stabilité.

Un approche alternative inspirée des résultats sur G consiste à utiliser des interactions effectives phénoménologiques dépendant de la densité proposées par Skyrme, Migdal, Brink et Bøcker, Vautherin et Brink, Gogny ... (cf. par exemple [19]). Ces interactions présentent un intérêt majeur : la faisabilité des calculs qui leur est associée permet notamment d'obtenir des relations relativement simples entre différentes propriétés nucléaires mesurées expérimentalement et les paramètres de la force utilisée. On peut classer les interactions effectives phénoménologiques en fonction du comportement de leur partie centrale qui peut être soit de portée nulle tels les potentiels de Skyrme qui utilise une force δ (avec des termes correctifs), soit de portée finie telle que l'interaction de Gogny où la partie centrale est représentée par deux gaussiennes. Une fois la forme analytique de l'interaction effective choisie, les paramètres sont ajustés de telle sorte qu'ils reproduisent un ensemble limité de propriétés expérimentales.

Aujourd'hui, l'utilisation de ces interactions effectives (qui dépendent de la densité comme celles de Skyrme et Gogny) permet de reproduire les propriétés nucléaires de basse énergie comme l'énergie de liaison, le rayon, le moment quadrupolaire, le moment angulaire, ... à travers toute la table périodique avec un nombre limité de paramètres. Ces paramètres sont déterminés en particulier par des propriétés plus générales de matière nucléaire. Les calculs Hartree-Fock utilisant l'interaction de Gogny sont substantiellement plus lourds en ce qui concerne le traitement numérique. L'interaction de Skyrme, quant à elle étant de portée nulle conduit, d'une part, à des calculs numériques plus simples. Elle permet, d'autre part, de mettre en œuvre facilement les calculs Hartree-Fock dans l'espace de configuration avec la construction d'une fonctionnelle pour l'énergie totale du noyau. Nous avons choisi cette interaction dans nos calculs.

1.2.6 Interaction de Skyrme

Proposée en 1959 par Skyrme [20] elle contenait au début un terme à deux corps et un terme à trois corps :

$$\hat{V} = \sum_{i < j} v_{ij}^{(2)} + \sum_{i < j < k} v_{ijk}^{(3)} \quad (1.36)$$

avec

$$v_{ijk}^{(3)} = t_3 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \quad (1.37)$$

Vautherin et Brink [7] ont montré l'équivalence entre le terme à trois corps et une interaction δ à deux corps dépendant de la densité si le renversement du sens du temps n'est pas brisé :

$$v_{ijk}^{(3)} \longrightarrow v_{ij}^{(2)} = \frac{t_3}{6} (1 + \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \quad (1.38)$$

De nos jours, la forme standard de cette interaction est :

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & t_0(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \text{ terme central} \\
 & + \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 \hat{P}_\sigma) [\overleftarrow{k}'^2 \delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}) \overrightarrow{k}^2] + t_2 (1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \overleftarrow{k}'^2 \cdot \delta(\mathbf{r}) \overrightarrow{k}^2 \text{ termes non locaux} \\
 & + i W (\sigma_1 + \sigma_2) \overleftarrow{k}' \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \overrightarrow{k} \text{ terme spin-orbite} \\
 & + \frac{t_3}{6} (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \text{ terme dépendant de la densité} \quad (1.39)
 \end{aligned}$$

où \overrightarrow{k} est le moment relatif des particules 1 et 2 qui agit sur sa droite :

$$\overrightarrow{k} = \frac{1}{2i} (\overrightarrow{\nabla}_1 - \overrightarrow{\nabla}_2) \quad (1.40)$$

et \overleftarrow{k}' est le conjugué de \overrightarrow{k} qui agit sur sa gauche

$$\overleftarrow{k}' = -\frac{1}{2i} (\overleftarrow{\nabla}_1 - \overleftarrow{\nabla}_2) \quad (1.41)$$

avec $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)$ opérateur d'échange de spin.

Les paramètres de la force $(t_0, t_1, t_2, t_3, W_0, x_0, x_1, x_2, x_3)$ ont été ajustés sur les données expérimentales. Il existe de nombreuses paramétrisations de la force de Skyrme. Certaines sont meilleures pour un type de propriétés nucléaires. Les deux premières SI et SII ont été introduites par Vautherin et Brink [7]. Avec la paramétrisation SII, ils ont réussi à reproduire les états fondamentaux notamment l'énergie de liaison et le rayon des noyaux à travers toute la table périodique. Avec une force indépendante de la densité, on n'était pas capable d'avoir ce magnifique résultat.

Les forces SIII-SVI ont été paramétrisées par Beiner *et al.* [21] au moyen d'un fit de données de masse et de rayon de charge de noyaux sphériques. Parmi-elles, la force SIII est plus populaire grâce à sa capacité à reproduire très correctement les propriétés statiques fondamentales des noyaux à travers toute la table périodique (cf. par exemple [77] pour les noyaux impairs). Quelques temps après la détermination des paramètres de SIII, la mesure expérimentale de la résonance géante monopolaire a permis d'accéder à une valeur de l'incompressibilité de la matière nucléaire. Pour tenir compte de cette nouvelle donnée, Krivine *et al.* ont proposé la paramétrisation SkM [22]. Elle a été modifiée (SkM*) par Bartel *et al.* [23] pour reproduire de façon très satisfaisante les barrières de fission dans le ^{240}Pu . Le travail de L. Bonneau [24] a confirmé que cette force est satisfaisante du point de vue spectroscopique pour étudier les très grandes déformations des noyaux lourds. Nguyen Van Giai et Sagawa [25] ont pu obtenir avec une autre paramétrisation SGII des valeurs satisfaisantes des paramètres de Landau de spin et spin-isospin. Dobaczewski *et al.* [26] ont traité les corrélations d'appariement dans les isotopes

d'étain avec la force SkP. Chabanat *et al.* [27] ont pu raisonnablement bien décrire avec SLy4 les propriétés spectroscopiques des noyaux loins de la vallée de stabilité.

Les jeux de paramètres correspondant à SIII, SkM* et Sly4 sont indiqués dans le table 1.1.

Force	SIII	SkM*	SLY4
$t_0(\text{MeV.fm}^3)$	-1128.75	-2645.00	-2488.91
$t_1(\text{MeV.fm}^5)$	395.00	410.00	486.82
$t_2(\text{MeV.fm}^5)$	-95.00	-135.00	-546.39
$t_3(\text{MeV.fm}^{(3+3\alpha)})$	14000.00	15595.0	13777.0
x_0	0.450	0.090	0.834
x_1	0.0	0.0	-0.344
x_2	0.0	0.0	-1.0
x_3	1.0	0.0	1.354
α	1	1/6	1.6
$W_0(\text{MeV.fm}^5)$	120.0	130.0	123.0

TABLE 1.1 – Quelques paramétrisations de l'interaction effective phénoménologique de Skyrme

. Toutes ces forces ne font pas que reproduire les propriétés particulières pour lesquelles elles ont été créées. Néanmoins les trois forces retenues dans la Table 1.1 sont généralement considérées comme très satisfaisantes pour reproduire les propriétés spectroscopiques des noyaux (cf par exemple comme on a déjà noté [77]).

1.2.7 Fonctionnelle énergie

Les auteurs de la référence [7] ont montré qu'avec une interaction de Skyrme :

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{H}_{\text{total}}(\mathbf{r}) \quad (1.42)$$

où la densité d'énergie totale $\mathcal{H}_{\text{total}}(\mathbf{r})$ est la somme de la densité liée à la force de Skyrme et de celle liée à l'énergie coulombienne :

$$\mathcal{H}_{\text{total}}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_{\text{Sk}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) \quad (1.43)$$

Cette densité hamiltonienne est une fonctionnelle de la densité à 1 corps (éléments de matrice diagonaux en \mathbf{r} de $\hat{\rho}$) qui pour un déterminant de Slater pair par renversement du sens du temps pourra, de façon quelque peu arbitraire, se décomposer comme :

$$\mathcal{H}_{\text{Sk}}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_{\text{kin}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{vol}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{surf}}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{so}}(\mathbf{r}) \quad (1.44)$$

dont les différents termes dépendent d'un certain nombre de densités locales. Les densités de spin-vecteur et de courant n'interviennent pas pour des solutions paires par renversement du sens du temps. C'est pourquoi nous n'aurons pas à les considérer pour décrire les états

fondamentaux des noyaux pair-pairs. Nous ne devons considérer que les densités de matière, d'énergie cinétique et de spin-orbite définies à partir des fonctions d'onde ϕ_i du déterminant de Slater respectivement :

- la densité normale des nucléons :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_i(\mathbf{r}, \sigma)|^2 \quad (1.45)$$

- la densité d'énergie cinétique normale (spin scalaire) :

$$k(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\vec{\nabla} \phi_i(\mathbf{r}, \sigma)|^2 \quad (1.46)$$

- la densité spin-orbite :

$$\vec{J}(\mathbf{r}) = (-i) \sum_{i,\sigma,\sigma'} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) [\vec{\nabla} \phi_i(\mathbf{r}, \sigma) \times \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle] \quad (1.47)$$

où les sommations i (espace), et σ, σ' (spin) portent sur tous les états occupés d'une particule et τ représente les différents états de charge (les neutrons (n) et les protons (p)). Dans ce qui suit l'indice d'isospin τ affectant les densités signifie que les sommations sur les indices i et j n'impliquent que des densités d'état ayant même isospin τ . Les densités notées sans indices τ sont égales à la somme des densités neutron et proton correspondantes.

$$\mathcal{H}_{\text{kin}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (1.48)$$

$$\mathcal{H}_{\text{vol}}(\mathbf{r}) = B_1(\rho)^2 + B_2 \sum_{\tau} (\rho)^2 + B_7(\rho)^{\alpha+2} + B_8(\rho)^{\alpha} \sum_{\tau} (\rho_{\tau})^2 + B_3 \rho k + B_4 \sum_{\tau} \rho_{\tau} k_{\tau} \quad (1.49)$$

$$\mathcal{H}_{\text{surf}}(\mathbf{r}) = B_5 \rho \vec{\nabla}^2 \rho + B_6 \sum_{\tau} \rho_{\tau} \vec{\nabla}^2 \rho_{\tau} \quad (1.50)$$

$$\mathcal{H}_{\text{so}}(\mathbf{r}) = B_9 \left(\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \sum_{\tau} \rho_{\tau} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{\tau} \right) \quad (1.51)$$

où la dépendance en \mathbf{r} des différentes densités est implicite. Notons que le terme d'énergie cinétique \mathcal{H}_{kin} est multiplié par un facteur $(A-1)/A$, pour l'écriture du problème variationnel en vue d'effectuer une correction approchée à un corps du centre de masse, en négligeant la correction à deux corps. L'expression des coefficients B_i en fonction des paramètres de la force est précisée dans la table 1.2

La contribution directe de l'interaction Coulombienne est traitée exactement mais pour le terme d'échange nous utilisons l'approximation de Slater :

B_1	$\frac{1}{2}t_0(1 + \frac{1}{2}x_0)$	B_8	$-\frac{1}{12}t_3(\frac{1}{2} + x_3)$
B_2	$-\frac{1}{2}t_0(\frac{1}{2} + x_0)$	B_9	$-\frac{1}{2}W_0$
B_3	$\frac{1}{4}[t_1(1 + \frac{1}{2}x_1) + t_2(1 + \frac{1}{2}x_2)]$	B_{10}	$\frac{1}{4}t_0x_0$
B_4	$-\frac{1}{4}[t_1(\frac{1}{2} + x_1) - t_2(\frac{1}{2} + x_2)]$	B_{11}	$-\frac{1}{4}t_0$
B_5	$-\frac{1}{16}[3t_1(1 + \frac{1}{2}x_1) - t_2(1 + \frac{1}{2}x_2)]$	B_{12}	$\frac{1}{24}t_3x_3$
B_6	$\frac{1}{16}[3t_1(\frac{1}{2} + x_1) + t_2(\frac{1}{2} + x_2)]$	B_{13}	$-\frac{1}{24}t_3$
B_7	$\frac{1}{12}(1 + \frac{1}{2}x_3)$		

 TABLE 1.2 – Expression des coefficients B_i

$$\mathcal{H}_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\rho_p V_{\text{Coul}} - \frac{3e^2}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}(\rho_p)^{4/3} \quad (1.52)$$

où e est la charge du proton, ρ_p est la densité de proton et le potentiel V_{Coul} s'exprime comme :

$$V_{\text{Coul}} = e^2 \int d^3\mathbf{r} \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1.53)$$

On voit en pratique que cette fonctionnelle d'énergie n'est pas la valeur moyenne exacte du Hamiltonien pour un état de particule indépendant donné mais n'en est qu'une approximation. Le terme d'échange de Coulomb dans l'approximation de Slater représenté par le deuxième terme de l'équation ci-dessus est un terme dépendant de la densité dans la fonctionnelle d'énergie de Skyrme. Les travaux de la référence [28] ont montré que pour des noyaux légers (jusqu'au ^{56}Ni) qu'une telle approximation conduit à une erreur (par rapport à la valeur exacte de l'énergie de Coulomb échange) qui est une fonction décroissante du nombre de nucléons et qui est inférieure à 5% pour le ^{56}Ni . Il est intéressant de noter que cette approximation a été testée pour des noyaux sphériques [70] en utilisant les forces SkP et SkM* et pour des calculs HFB utilisant la force de Gogny [71].

1.2.8 Hamiltonien de Hartree-Fock \hat{h}

En dérivant la fonctionnelle énergie (1.42) pour un noyau pair-pair, on peut, dans la représentation position, mettre \hat{h} sous la forme :

$$\hat{h}^{(\tau)}\phi_i = \left[-\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m_\tau^*(\mathbf{r})} \vec{\nabla} + U_\tau(\mathbf{r}) + \nabla W_\tau \cdot (-i\nabla \times \hat{\sigma}) \right] \phi_i \quad (1.54)$$

Le premier terme est appelé terme de masse effective (cette dernière est notée $m_\tau^*(\mathbf{r})$), le second est le potentiel central $U_\tau(\mathbf{r})$ (contenant le potentiel coulombien) tandis que le troisième contient le potentiel spin-orbite $W_\tau(\mathbf{r})$. Ils sont définis respectivement par :

$$\frac{\hbar^2}{2m_\tau^*(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m} + B_3\rho + B_4\rho_\tau \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} U_\tau = & 2(B_1\rho + B_2\rho_\tau) + (B_3k + B_4k_\tau) \\ & + 2(B_5\Delta\rho + B_6\Delta\rho_\tau) \\ & + (2 + \alpha)B_7\rho^{1+\alpha} + B_8 [\alpha\rho^{\alpha-1}(\rho_n^2 + \rho_p^2) + 2\rho^\alpha\rho_\tau] \\ & + B_9(\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_\tau) + \delta_{q,p}[V_{\text{Coul}} - e^2(\frac{3}{\pi}\rho_p)^{1/3}] \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$\nabla W_\tau = -B_9(\nabla\rho + \nabla\rho_\tau) + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\vec{J}_\tau \quad (1.57)$$

Pour résoudre les équations de Hartree-Fock nous avons développé les fonctions d'ondes individuelles sur la base $\varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma)$:

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, \tau) = \chi_\tau \sum_\alpha C_\alpha^{(i)} \varphi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma) \quad (1.58)$$

où χ_τ est la fonction d'isospin. Appelant $C_\alpha^{(i)}$ les composantes du vecteur propre de \hat{h}_{HF} associé à la valeur propre e_i on a :

$$\sum_\beta h_{\alpha\beta}^{(\tau)} C_\beta^{(i)} = e_i C_\alpha^{(i)} \quad (1.59)$$

où

$$h_{\alpha\beta}^{(\tau)} = \langle \varphi_\alpha | \hat{h}^{(\tau)} | \varphi_\beta \rangle = \int d^3\mathbf{r} \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}, \sigma) \hat{h}^{(\tau)} \varphi_\beta(\mathbf{r}, \sigma) \quad (1.60)$$

La résolution des équations de Hartree-Fock se ramène ainsi à la diagonalisation du hamiltonien $h_{\alpha\beta}^{(\tau)}$ dans la base φ_α , séparément pour chaque état de charge.

1.2.9 Calcul Hartree-Fock sous contrainte

Les surfaces d'énergie potentielle des noyaux sont des quantités essentielles car elles donnent des indications sur la déformabilité du noyau. La méthode Hartree-Fock sans contrainte nous donne des points isolés dans cette surface aux déformations qui minimisent l'énergie totale du noyau. Pour obtenir les autres points, il est nécessaire d'employer la méthode de Hartree-Fock sous contrainte où on minimise la fonctionnelle énergie en contraignant un ou plusieurs

opérateurs de déformation à avoir une valeur moyenne fixée (q) dans l'état solution $|\Phi_i(q)\rangle$. Nous choisissons dans cette étude les moments multipôlaire \hat{Q}_{lm} :

$$q \equiv \langle \Phi_i | \hat{Q}_{lm} | \Phi_i \rangle = \langle \hat{Q}_{lm} \rangle \quad (1.61)$$

La méthode pour résoudre un tel problème variationnel est d'ajouter un terme au Hamiltonien :

$$\langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_i \rangle + f(\mu_l, \langle \hat{Q}_{lm} \rangle) \quad (1.62)$$

où f est une fonction d'un paramètre μ_l et $\langle \hat{Q}_{lm} \rangle$ et de minimiser $\langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_i \rangle$ au lieu de $\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_i \rangle$. Plusieurs cas peuvent être considérés pour f :

+ pas de contrainte où $f(\mu_l, \langle \hat{Q}_{lm} \rangle) = 0$

+ contrainte linéaire où $f(\mu_l, \langle \hat{Q}_{lm} \rangle) = -\mu_l \langle \hat{Q}_{lm} \rangle$

+ contrainte quadratique où $f(\mu_l, \langle \hat{Q}_{lm} \rangle) = -\frac{C}{2}(\langle \hat{Q}_{lm} \rangle - \mu_l)^2$

Le type de contrainte utilisé dans nos calculs est la contrainte quadratique. Comme les noyaux étudiés ne semblent pas manifester une tendance à une triaxialité bien marquée, nous avons imposé la symétrie axiale. En conséquence, nous ne considérons que les moments multipôlaire correspondant à cette symétrie :

+ le moment quadrupolaire axial \hat{Q}_{20} caractérisant l'élongation du noyau.

+ le moment octupolaire axial \hat{Q}_{30} donnant une mesure de l'asymétrie gauche-droite (brisure de la symétrie de réflexion par rapport au plan $z = 0$, donc brisant la parité)

+ la position du centre de masse du système total $\hat{Q}_{10} = \hat{z}$.

1.2.10 Calculs Hartree-Fock brisant la parité

Dans le cas d'un noyau isolé, le hamiltonien \hat{H} du système (1.2) possède les symétries suivantes :

+ l'invariance par translation ; le potentiel dépend de la coordonnée relative $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ entre deux points 1 et 2 et non de la coordonnée de leur centre de masse.

+ l'invariance galiléenne.

+ l'invariance par rotation dans l'espace des coordonnées.

+ l'invariance par le renversement du sens du temps.

+ l'invariance par une réflexion d'espace.

+ l'invariance dans l'échange des particules identiques qui impose que pour des fermions les seuls états possibles soient des états complètement antisymétriques.

+ l'invariance par rotation dans l'espace des isospins pour l'essentiel de l'interaction forte.

Une fonction d'onde exacte d'un tel noyau est un état propre de \hat{H} ainsi que des opérateurs générant les symétries \hat{S} ci-dessus et avec lesquels \hat{H} commute :

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0 \quad (1.63)$$

Ces invariances se reflètent dans l'existence de nombres quantiques qualifiant les vrais états propres $|\Psi\rangle$ (1.1). En revanche, cela n'est pas nécessairement réalisé pour des états $|\Phi\rangle$ approchés (comme des déterminants de Slater). Dans ce cas en effet, les états approchés $|\Phi\rangle$ sont déterminés non pas à partir du vrai hamiltonien \hat{H} mais à partir du hamiltonien effectif (1.6) qui ne possèdent pas nécessairement les invariances de \hat{H} en raison de la dépendance vis à vis de la densité.

Le hamiltonien du système (1.6) a les symétries de l'interaction utilisée. La fonction d'essai utilisée dans le champ moyen Φ est seulement une approximation simple de fonction d'onde exacte Ψ qui doit contenir toutes les « corrélations » de la solution exacte du problème stationnaire. A cause de sa forme simple, elle brise le plus souvent quelques symétries importantes du Hamiltonien \hat{H} comme : les invariances par translation, par rotation et par parité. L'hamiltonien de champ moyen auto-cohérent construit sur ces fonctions d'onde d'essai, ne commute pas, le plus souvent, avec les opérateurs représentant ces symétries. C'est une brisure spontanée de symétrie liée au champ moyen nucléaire.

Concrètement, le hamiltonien Hartree-Fock \hat{h} est la réduction à un corps du hamiltonien effectif \hat{H} . Donc, \hat{h} dépend des fonctions d'onde individuelles. Avec la force de Skyrme, cette dépendance s'exprime via la densité à un corps ρ , la densité cinétique k et le courant de spin \vec{J} . Si nous imposons par exemple les symétries axiale et de réflexion droite-gauche, ces densités locales sont invariantes sous l'action des opérateurs \hat{j}_z et $\hat{\pi}$ associés à ces deux symétries. Dans ce cas, les trois opérateurs \hat{h} , \hat{j}_z et $\hat{\pi}$ forment un ensemble d'observables qui commutent. Alors \hat{h} prend la forme d'une matrice diagonale par blocs où chaque bloc est caractérisé par ω^p avec ω , p qui sont respectivement des valeurs propre de \hat{j}_z et $\hat{\pi}$. Par conséquent, la diagonalisation

de \hat{h} se ramène à celles effectuées dans chaque bloc ω^p . Ceci rend le calcul beaucoup plus rapide que la diagonalisation de \hat{h} entier. Au contraire, si la matrice densité utilisée comme point de départ des itérations du calcul brise un certain nombre de symétries, alors le hamiltonien Hartree-Fock pourra également briser ces symétries. Mais le processus itératif peut aussi bien converger même dans ce cas vers une solution symétrique si celle-ci est préférable du point de vue énergétique.

La plupart des codes Hartree-Fock construits avec une force de Skyrme considèrent des solutions symétriques par réflexion par rapport au plan équatorial (perpendiculaire à l'axe Oz dans notre cas). Dans ce cas, le centre de masse du noyau appartient à ce plan et est choisi comme origine du repère intrinsèque. Le plan de symétrie a donc pour équation $z = 0$ et dans ce repère attaché au noyau, la symétrie de parité est par conséquent explicitement imposée.

Si nous imposons une condition de symétrie, nous nous limitons aux solutions possédant une symétrie donnée. En effet, les surfaces d'énergie sont en général déterminées en fonction d'un petit nombre de degrés de liberté. Les degrés de liberté non traités explicitement sont soit complètement relâchés, soit inaccessibles parce que des symétries sont imposées à la fonction d'onde totale. Rien n'assure que les minima trouvés ne sont pas en fait des points selles en fonction des degrés de liberté non traités.

Le code Hartree-Fock axial imposant la symétrie de réflexion droite-gauche a donc été étendu [24] de manière à autoriser une brisure de la parité. Pour cela, nous avons supprimé la condition $f(r, z) = f(r, -z)$ pour toute fonction f intervenant dans le code symétrique et avons remplacé les intégrales de la forme :

$$2 \int_0^{+\infty} f(r, z) dz \quad (1.64)$$

par

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(r, z) dz \quad (1.65)$$

Cela correspond aussi à mélanger les sous-matrices ω^- et ω^+ de parités différentes dans la matrice du hamiltonien Hartree-Fock à diagonaliser (ω désignant une valeur propre de \hat{j}_z). Nous avons aussi contraint le centre de masse à coïncider avec l'origine du repère intrinsèque. Compte tenu de la symétrie axiale de nos solutions, il suffit pour cela d'imposer que :

$$\langle z \rangle = 0 \quad (1.66)$$

Dans ce cas de mélange de parité, les états de la base $|\alpha\rangle$ intervenant dans l'équation (1.58) n'ont pas tous la même parité donc $|\Phi\rangle$ perd aussi la propriété d'avoir une parité bien déterminée.

1.3 Corrélations d'appariement

1.3.1 Insuffisance de la méthode Hartree-Fock

L'approximation de Hartree-Fock réussit à faire le lien entre l'interaction nucléon-nucléon effective et le champ moyen au prix de négliger une partie des effets de la force nucléon-nucléon. C'est pourquoi, en pratique cette approche est à la rigueur capable de décrire raisonnablement seulement les noyaux magiques (couches complètes) où l'interaction résiduelle peut être considérée comme une perturbation négligable.

Partant du hamiltonien microscopique \hat{H} on peut faire apparaître une interaction résiduelle \hat{V}_{res} en additionnant et soustrayant de \hat{H} un champ moyen \hat{U}_{HF} :

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}_{\text{HF}} + \hat{V} - \hat{U}_{\text{HF}} \quad (1.67)$$

$$= \hat{H}_{\text{HF}} + \hat{V}_{\text{res}} \quad (1.68)$$

avec :

$$\hat{V}_{\text{res}} = \hat{V} - \hat{U}_{\text{HF}} \quad (1.69)$$

Soit $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ l'état fondamental à l'approximation de Hartree-Fock correspondant au Hamiltonien \hat{H}_{HF} conduisant à une énergie fondamentale approchée E_{HF} . Nous appelons $|\Phi_{\text{HF}}^{pt}\rangle$ les états d'excitation particule-trou sur $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ considéré comme un quasi-vide.

Dans les noyaux magiques l'énergie minimale ε qu'il faut transférer à un nucléon pour passer de la dernière couche majeure pleine à la première couche majeure vide est au moins égale à la différence en énergie séparant ces deux couches, c'est-à-dire typiquement de l'ordre de 3 ou 4 MeV. La fonction d'onde de l'état fondamental $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ est donc très loin d'être dégénérée avec les différents états excités par excitation particule-trou $|\Phi_{\text{HF}}^{pt}\rangle$ et le déterminant de Slater $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ issu d'un calcul de champ moyen est une très bonne approximation de cet état fondamental. On peut donc espérer pouvoir négliger l'interaction résiduelle :

$$|\Psi\rangle \simeq |\Phi\rangle, \quad E \simeq E_{\text{HF}} \quad \text{et} \quad \hat{V}_{\text{res}} \simeq 0 \quad (1.70)$$

Au contraire, pour des noyaux déformés éloignés de la magie, cette énergie est beaucoup plus petite, généralement inférieure à 1 MeV. Les états excités de plus basse énergie ont donc des énergies très proches du quasi-vide et peuvent se coupler à lui au travers de l'interaction résiduelle à 2 corps \hat{V}_{res} négligée dans les théories de champ moyen. Ce couplage est d'autant plus fort que ε est faible, ceci se comprend aisément dans le cadre d'un traitement en perturbations. Etant donné que la plupart des noyaux sont non magiques, il est donc pratiquement toujours nécessaire de prendre en compte l'interaction résiduelle entre les nucléons. Dans ce

cas, l'état fondamental "vrai" du noyau est en fait un état propre $|\Psi\rangle$ de \hat{H} avec comme valeur propre l'énergie "vraie" E ($E < E_{\text{HF}}$). Pour reconstruire une fonction d'onde représentant correctement l'état fondamental de ces noyaux, il est donc nécessaire d'aller au delà du champ moyen, en tenant compte de différentes corrélations.

On peut formellement obtenir $|\Psi\rangle$ et E en diagonalisant \hat{H} dans la base composée de $|\Phi_{\text{HF}}\rangle$ et de l'ensemble des états excités à N particules - N trous. Le résultat dépend de l'intensité du couplage introduit par les éléments de matrice de l'interaction résiduelle \hat{V}_{res} comparée aux énergies d'excitation des différents états. En fait, cette méthode est la plupart du temps impraticable car le nombre des configurations excitées qu'il faut inclure pour arriver à une bonne approximation de l'énergie vraie E est généralement colossal. Devant cette impossibilité de tenir compte en une seule fois des effets de l'interaction résiduelle \hat{V}_{res} , on adopte une méthode par étapes. Elle consiste à incorporer successivement les différentes composantes de \hat{V}_{res} en commençant par les plus importantes. Pour ce faire, on enrichit progressivement la forme de la fonction d'onde de l'état fondamental en prenant des expressions de plus en plus élaborées.

Il y a plusieurs corrélations qui sont générées par cette interaction résiduelle comme par exemple : les corrélations d'appariement, les corrélations vibrationnelles . . . Parmi ces corrélations, les corrélations d'appariement se manifestent le plus fortement dans les noyaux à couches de proton et/ou neutron ouvertes. Comme elle est forte et attractive, elle crée donc une énergie de liaison supplémentaire et génère des paires de nucléons corrélés au sein du noyau. Les manifestations expérimentales qui montrent l'existence de la corrélation d'appariement dans la matière nucléaire sont :

- + l'effet pair-impair dans les énergies de liaison des noyaux : d'une part, les noyaux pair-pairs dans leur état fondamental ont dans le modèle de la goutte liquide, une énergie de liaison supplémentaire égale à $2\Delta \simeq 24A^{-1/2}$ (Δ est l'énergie liée à la brisure d'une paire de nucléons appariés) à celle qu'on devrait considérer pour des noyaux impair-impairs. L'explication est que chaque nucléon se lie avec un autre qui est son état conjugué par renversement du sens du temps pour former une paire. Dans le cas des noyaux impairs, cet écart est divisé par deux (grossièrement). D'autre part, les noyaux pair-pairs dans leur état fondamental ont un spin et une parité $J^\pi = 0^+$.

- + l'existence d'un gap en énergie : les spectres de noyaux déformés montrent une différence entre des noyaux pair-pair et pair-impairs. Dans une gamme de 1.5 MeV d'énergie d'excitation, les noyaux pair-pairs ne possèdent que quelques états collectifs appartenant aux bandes rotationnelles et vibrationnelles tandis que les noyaux pair-impairs possèdent de nombreux états collectifs et individuels.

+ la déviation (qui peut être de l'ordre d'un facteur deux) entre le moment d'inertie des noyaux déformés mesurés expérimentalement et celui d'un noyau assimilé à un corps rigide en rotation.

Proposé à la fin des années 1950 par Aage Bohr, Ben Mottelson et David Pines [29], ce phénomène d'appariement est très analogue à celui de la supraconductivité en physique du solide. Il joue un rôle important dans la description des spectres des noyaux à basse énergie. Cela suggère d'adopter comme état fondamental un état de paires indépendantes plus riche que l'état de particules indépendantes. La théorie de champ moyen fondée sur un tel état constitue l'approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB).

Pour l'état fondamental, la fonction d'onde d'essai n'est plus simplement un déterminant de Slater mais doit correspondre à un état de paires indépendantes appelé vide de quasi-particules ou quasi-vide de Bogoliubov. En fait, pour décrire ces corrélations d'appariement, nous pouvons utiliser l'approche de Bardeen-Cooper-Schriffer (BCS) [30], qui peut-être considérée comme une approximation de la théorie HFB (avec une transformation de Bogoliubov simplifiée appelée transformation de Bogoliubov-Valatin).

1.3.2 Approximation de Bardeen-Cooper-Schriffer (BCS)

Dans la méthode BCS on représente la fonction d'onde pour les noyaux pair-pairs sous la forme :

$$|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{i>0} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |0\rangle \quad (1.71)$$

qui s'applique quand \hat{H} est invariant par renversement du sens du temps (donc pour des hamiltoniens conduisant à la dégénérescence de Kramers) et où le produit porte sur la moitié de l'espace de configuration d'une particule indiqué par $i > 0$ (l'autre moitié correspondant à l'espace transformé par renversement du sens du temps du premier). L'état $|0\rangle$ représente le vrai vide de particules (par rapport aux opérateurs de particules a^\dagger et a). Les paramètres u_i et v_i sont des paramètres variationnels réels, tels que v_i^2 et u_i^2 représentent respectivement la probabilité qu'un état de paire (i, \bar{i}) soit occupé ou non. Ces deux paramètres sont déterminés de telle sorte que l'énergie soit minimale. Ces deux paramètres vérifient la relation évidente :

$$u_i^2 + v_i^2 = 1 \quad (1.72)$$

L'état $|\bar{i}\rangle$ est l'état conjugué de $|i\rangle$ par renversement du sens du temps : $|\bar{i}\rangle = \hat{T}|i\rangle$. Le développement du produit de l'équation (1.71) nous donne :

$$|\Phi_{\text{BCS}}\rangle \propto |0\rangle + \sum_{i>0} \frac{v_i}{u_i} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger |0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{ii'>0} \frac{v_i v_{i'}}{u_i u_{i'}} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_{i'}^\dagger a_{\bar{i}'}^\dagger |0\rangle + \dots \quad (1.73)$$

L'état $|\Phi_{\text{BCS}}\rangle$ est donc une superposition infinie d'états ayant des nombres différents de paires. Il n'est donc pas un état propre de l'opérateur nombre de particules \hat{N} . On fait seulement en sorte de garantir que ces nombres soient égaux en valeur moyenne à ceux désirés au moyen de contraintes sur l'opérateur nombre de particules \hat{N} , en utilisant des multiplicateurs de Lagrange.

Pour dériver l'équation de BCS, on suppose que le système à N corps est décrit par le hamiltonien écrit en seconde quantification comme :

$$\hat{H} = \sum_i e_i a_i^\dagger a_i + \frac{1}{4} \sum_{i,i'>0} \tilde{v}_{\bar{i}\bar{i}'\bar{i}} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{i}'} a_{i'} \quad (1.74)$$

Le premier terme correspond à la contribution de champ moyen qui est construite par la méthode Hartree-Fock. Les états i et i' sont des état individuels Hartree-Fock. Le deuxième terme représente l'interaction résiduelle qui tient compte des corrélations de paires. Comme nous traitons des noyaux dont les nombres de neutrons et de protons différents donc les fonctions d'onde d'espace et de spin des états proches de la surface de Fermi sont très différentes, l'interaction résiduelle neutron-proton est négligée. Donc toutes les équations que nous dérivons sont valables séparément pour chacun des deux états d'isospin. Pour avoir le nombre de particules conservé en moyenne on ajoute (comme on a vu) au hamiltonien un multiplicateur de Lagrange pour chaque état de charge et on minimise :

$$\hat{H}' = \sum_i (e_i - \lambda) a_i^\dagger a_i + \frac{1}{4} \sum_{i,i'>0} \tilde{v}_{\bar{i}\bar{i}'\bar{i}} \quad (1.75)$$

La valeur moyenne de \hat{H}' dans l'état $|\Phi_{\text{BCS}}\rangle$ (1.71) vaut :

$$\langle \Phi_{\text{BCS}} | \hat{H}' | \Phi_{\text{BCS}} \rangle = \sum_i \left[(e_i - \lambda) v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i'} \tilde{v}_{\bar{i}\bar{i}'\bar{i}} v_i^2 v_{i'}^2 \right] + \sum_{\bar{i}\bar{i}'>0} \tilde{v}_{\bar{i}\bar{i}'\bar{i}} u_i v_i u_{i'} v_{i'} \quad (1.76)$$

La variation de l'énergie (1.76) par rapport à v_i nous conduit aux équations de BCS :

$$2\tilde{e}_i u_i v_i + \Delta_i (v_i^2 - u_i^2) = 0, \quad \forall i > 0 \quad (1.77)$$

avec

$$\tilde{e}_i = e_i + \sum_{i'} \tilde{v}_{\bar{i}\bar{i}'\bar{i}} v_{i'}^2 - \lambda \quad (1.78)$$

où la quantité Δ_i est appelée gap du niveau i , d'expression :

$$\Delta_i = - \sum_{\bar{i}} \tilde{v}_{\bar{i}\bar{i}'\bar{i}} u_{\bar{i}} v_{\bar{i}'} \quad (1.79)$$

Pour des valeurs fixées de \tilde{e}_i et Δ_i , on obtient les expressions suivantes pour v_i^2 et u_i^2 :

$$v_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\tilde{e}_i}{\sqrt{\tilde{e}_i^2 + \Delta_i^2}} \right] \quad \text{et} \quad u_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\tilde{e}_i}{\sqrt{\tilde{e}_i^2 + \Delta_i^2}} \right] \quad (1.80)$$

En insérant ces expressions de u_i et v_i dans l'expression des paramètres de gap, on en déduit ce que l'on appelle l'équation du gap :

$$\Delta_i = -\frac{1}{2} \sum_{i'>0} \tilde{v}_{\bar{i}i'i'} \frac{\Delta_{i'}}{\sqrt{\tilde{e}_{i'}^2 + \Delta_{i'}^2}} \quad (1.81)$$

Ces équations sont complétées par la condition sur le nombre moyen de particules :

$$\langle \Phi_{\text{BCS}} | \hat{N} | \Phi_{\text{BCS}} \rangle = 2 \sum_{i>0} v_i^2 = N \quad (1.82)$$

La résolution des équations couplées (1.77) à (1.82) est effectuée de façon itérative pour un jeu donné d'états individuels Hartree-Fock $|i\rangle$. Nous ne considérons que les corrélations d'appariement dans le canal $|T_z = 1|$, négligeant comme on a vu les corrélations neutron-proton. Etant donné la façon dont l'interaction de Skyrme est construite [31, 32], il n'y a aucune raison a priori qu'elle fournisse une description correcte de type de corrélations. Nous avons utilisé une approximation pour l'interaction d'appariement qui consiste à utiliser une interaction qu'on appelle la force de séniorité :

$$G = -\tilde{v}_{\bar{i}i'i'} \quad \text{avec} \quad G > 0 \quad (1.83)$$

pour des états i et i' proches du niveau de Fermi ($G = 0$ au delà et en deçà).

Dans une telle approximation, toutes les formules dérivées précédemment se simplifient :

- le hamiltonien du système :

$$\hat{H} = \sum_i e_i (a_i^\dagger a_i) - G \sum_{i'i'>0} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_{i'} a_{i'} \quad (1.84)$$

- la valeur moyenne de \hat{H}' :

$$\langle \text{BCS} | \hat{H}' | \text{BCS} \rangle = 2 \sum_{i>0} \left(\tilde{e}_i v_i^2 + \frac{1}{2} G v_i^4 \right) - \frac{\Delta^2}{G} \quad (1.85)$$

avec $\tilde{e} = e_i - \lambda - G v_i^2$.

En général les termes en $G v_i^4$ et $G v_i^2$ sont négligés. Outre le fait qu'ils ne sont pas très importants (ils renormalisent faiblement les énergies des états individuels) ils correspondent à une contribution de la force de séniorité de type Hartree-Fock et leur prise en compte conduirait donc à un double comptage des termes de champ moyen.

On définit également la quantité que l'on appelle énergie de condensation de paires qui est l'énergie qui se rajoute à l'énergie de champ moyen calculée avec la force de Skyrme. Cette énergie est égale à :

$$E_{\text{cond}} = -\frac{\Delta^2}{G} \quad (1.86)$$

Les paramètres de gap sont alors indépendants de l'orbitale considérée :

$$\Delta = G \sum_{i>0} u_i v_i \quad (1.87)$$

et les paramètres variationnels d'occupation deviennent :

$$v_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{e_i - \lambda}{\sqrt{(e_i - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right] \quad \text{et} \quad u_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e_i - \lambda}{\sqrt{(e_i - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (1.88)$$

L'équation du gap s'écrit :

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{i>0} \frac{\Delta}{\sqrt{(e_i - \lambda)^2 + \Delta^2}} \quad (1.89)$$

et l'énergie de quasiparticules associée à l'orbitale i devient :

$$E_i = \sqrt{(e_i - \lambda)^2 + \Delta^2} \quad (1.90)$$

A partir des formules dérivées de l'approximation BCS, on peut montrer que pour une densité de niveaux réaliste cette théorie diverge. Pour que la méthode soit praticable, il convient d'effectuer une troncature en énergie des états participant au processus de diffusion de paires. Pour les noyaux appartenant à la région de masse qui nous intéresse, nous avons choisi de négliger les états individuels Hartree-Fock situés au-delà de l'énergie $\lambda + \Delta\varepsilon$ MeV. Dans notre travail le paramètre $\Delta\varepsilon$ et les valeurs G_n et G_p (neutron et proton respectivement) de l'intensité de la force de séniorité sont tirées de la référence [77]. La somme S définie par :

$$S = \sum_{i>0} u_i v_i \quad (1.91)$$

nulle en l'absence de corrélations, augmente avec la diffusivité de la surface de Fermi.

1.4 Méthode HTDA

On voit aisément que l'état $|\text{BCS}\rangle$ (1.71) est plus riche qu'un état de particules indépendantes $|\Phi\rangle$ pour la résolution approchée de l'équation de Schrödinger. En général, la théorie de BCS est bien adaptée pour des systèmes à grand nombre de particules (comme en physique du solide, où $N \sim 10^{23}$ et la non-conservation du nombre de particules n'a pas d'influence sur les quantités physiques parce que la dispersion varie en $1/\sqrt{N}$). Cependant, le nombre de nucléons

dans un noyau ($\sim 10^2$) et en particulier le nombre de nucléons de valence (~ 10) qui contrôlent le comportement des états excités à basse énergie est très limité, la théorie de BCS appliquée aux noyaux atomiques conduit parfois à de sérieuses erreurs. En effet, la non-conservation du nombre de particules a une grande incidence dans des cas où le produit de la densité de niveaux des états individuels près de la surface de Fermi par l'élément de matrice d'appariement moyen est petit par rapport à l'unité.

Pour résoudre ce problème théorique, l'une des solutions est de projeter les fonctions d'onde BCS sur des états ayant le bon nombre de particules [33]. On peut appliquer un principe variationnel soit avant la projection (PAV)[34] soit après la projection (VAP) [35, 36, 37]. Cependant, dans le cadre du modèle de BCS, la projection de la fonction d'onde après variation sur les états ayant le bon nombre de particules (PBCS), serait incapable de décrire correctement des corrélations d'appariement dans des noyaux, où la densité de niveaux autour de la surface de Fermi serait si faible, que le comportement d'une solution BCS et donc PBCS serait identique à celui de Hartree-Fock (cf. par exemple [19]). Dans ce cas, on peut penser à une méthode largement utilisée ces dernières années à savoir la méthode proposée dans un contexte plus général par Lipkin [38] et appliquée à ce problème particulier par Nogami [39]. Cependant, on a pu montrer que contrairement aux résultats obtenus dans des tests antérieurs effectués dans des situations restrictives [40], la validité de l'approche Lipkin-Nogami devait être mise en doute dans des situations d'appariement faible [2].

Une approche théorique correcte doit alors partir d'états propres de l'opérateur nombre de particules. L'approche **HTDA** (Higher Tamm Dancoff Approximation) a été proposée par le groupe de Bordeaux pour traiter les corrélations d'appariement au delà du champ moyen en garantissant une conservation exacte du nombre de particules. Elle a été appliquée dans des situations de faibles corrélations d'appariement, comme en [41] pour décrire le fondamental et les états isomériques dans le ^{178}Hf . Un code a été développé par la suite [4] avec succès pour étudier les noyaux impairs. Des calculs de routhian HTDA ont été effectués [42] pour décrire les bandes super-déformées dans la région $A \approx 190$. Dans le cadre de la même approche, une étude a été présentée en [5, 43] pour traiter les corrélations d'appariement isoscalaires et isovecteurs de l'état fondamental dans la région du ^{64}Ge . Ensuite, l'inclusion d'une partie des corrélations vibrationnelles dans l'approche HTDA a été effectuée pour le noyau doublement magique et sphérique ^{40}Ca [6].

1.4.1 Principe général de la méthode HTDA

Dans son principe, la méthode HTDA est une extension de l'approximation Tamm-Dancoff (TDA) conduisant à un calcul de type modèle en couche fortement tronqué sur une solution de champ moyen. En effet, elle consiste à diagonaliser le hamiltonien effectif dans une base tronquée, constituée de déterminants de Slater ayant le bon nombre de particules et obtenus

par excitations de type particules-trous sur le vide Hartree-Fock (ce dernier contenant déjà une bonne partie des propriétés physiques à un corps). Elle inclut ces excitations non seulement dans les états excités corrélés mais aussi dans le fondamental. Elle est équivalente à la méthode de variation après projection (VAP), à cause du théorème de Ritz dans un sous-espace à N particules tronqué de l'espace de Fock. Elle a pour but de décrire en particulier le phénomène de diffusion de paires autour de la surface de Fermi, et en général des excitations de type multi-particules multi-trous sur le vide Hartree-Fock. Dans ce cas la fonction d'onde totale devient une superposition de déterminants de Slater, ayant chacun le bon nombre de particules construits à partir des excitations de type $|n_p n_h\rangle$ avec n faible. Ainsi, elle permet de résoudre de façon approchée et par étape l'équation de Schrödinger quand on tient compte des corrélations au delà du champ moyen, c'est-à-dire celles qui sont négligées dans les théories du champ moyen.

1.4.2 Formalisme HTDA

Dans ce travail, nous nous limitons à développer le formalisme HTDA pour le calcul de l'état fondamental des noyaux pair-pairs en traitant séparément les corrélations des neutrons et des protons. Comme on a déjà vu, ceci est tout à fait justifié dans des noyaux lourds que nous étudions où le nombre de neutrons est très différent du nombre de protons. En pratique, nous allons partir du Hamiltonien effectif :

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \quad (1.92)$$

Comme dit précédemment, on va prendre pour le vide $|\Phi_0\rangle$ la solution Hartree-Fock résultant d'un calcul de champ moyen :

$$\hat{H}_{\text{HF}}|\Phi_0\rangle = E_0|\Phi_0\rangle \quad (1.93)$$

où $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}_{\text{HF}}$, \hat{U}_{HF} étant la réduction à un corps de \hat{V} pour $|\Phi_0\rangle$. On réécrit l'Hamiltonien $\hat{H}(1.92)$ de la manière suivante :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{MF}} + \hat{V}_{\text{res}} \quad (1.94)$$

$$= (\hat{K} + \hat{U}_{\text{HF}} - \langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle + E_R) + (\hat{V} - \hat{U}_{\text{HF}} + \langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle - E_R) \quad (1.95)$$

$$= (\langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + \hat{H}_{\text{IQP}} + E_R) + \hat{V}_{\text{res}} \quad (1.96)$$

où l'Hamiltonien de quasiparticules indépendantes est défini par :

$$\hat{H}_{\text{IQP}} = \sum_i \xi_i \eta_i^\dagger \eta_i \quad (1.97)$$

où η_i^\dagger est l'opérateur de création a_i^\dagger pour l'état de particule i (inoccupé) où l'opérateur d'annihilation a_i pour l'état de trou (occupé) et ξ_i est défini comme : $\xi_i = e_p^i$ ou $\xi_i = -e_t^i$ où e^i étant l'énergie de l'état à un corps de particule ou de trou. Le terme E_R est l'énergie de

réarrangement liée à la partie dépendant de la densité de \hat{V} .

L'interaction résiduelle est définie alors par :

$$\hat{V}_{\text{res}} = \hat{V} - \hat{U}_{\text{HF}} + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle - E_{\text{R}} \quad (1.98)$$

La constante $\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle - E_{\text{R}}$ est ajoutée et retranchée dans \hat{H} pour assurer que pour $|\Phi_0\rangle$ on ait :

$$\langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{H}_{\text{MF}} | \Phi_0 \rangle \quad (1.99)$$

donc

$$\langle \Phi_0 | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_0 \rangle = 0 \quad (1.100)$$

L'état $|\Phi_0\rangle$ possède le nombre de particules souhaité et peut tenir compte d'un certain nombre de contraintes (contrainte sur le moment quadrupolaire, octupolaire...), de symétries (symétrie axiale...) ou de brisure de symétrie (asymétrie droite-gauche...). Il correspond généralement à l'état schématisé par l'occupation des états individuels de la Figure 1.2 : les N particules occupent les $N/2$ états de plus basse énergie jusqu'à un niveau appelé niveau de Fermi, que l'on peut situer entre le dernier niveau occupé est le premier niveau vide. Il est usuel d'appeler les états de trous les états en dessous du niveau de Fermi, et états de particules les états au dessus du niveau de Fermi.

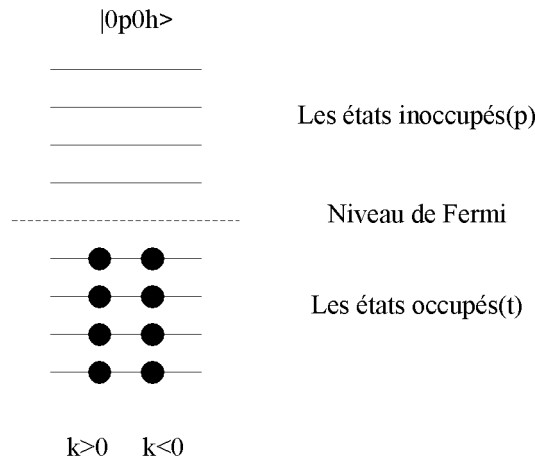


FIGURE 1.2 – Le vide $|\Phi_0\rangle$

On verra dans ce qui suit que le succès que rencontre cette méthode (temps de calcul, faisabilité) dépend crucialement du caractère réaliste de ce vide. En effet, par exemple lorsque la densité de niveaux autour de la surface de Fermi est forte dans certain cas, la convergence du

processus Hartree-Fock peut être difficile à obtenir, on peut alors introduire des corrélations d'appariements arbitraires (par exemple en utilisant l'approximation BCS) pour obtenir un champ moyen convergé à partir duquel on extrait le déterminant de Slater de plus basse énergie. Une telle introduction ne pose pas de problème de fond puisqu'elle sert simplement à initier un processus auto-cohérent qui sera défini plus loin.

Ce vide $|\Phi_0\rangle$ ainsi choisi va servir à la construction d'une base orthonormée à N particules dans laquelle on va diagonaliser l'Hamiltonien \hat{H} . En principe, la base à N corps est constituée par le déterminant de Slater qui correspond à l'état 0h0p et par toutes les excitations de quasi-particules sur ce vide compatible avec les symétries requises : 1h1p, 2h2p, 3h3p... L'ensemble des états $|\Phi_i\rangle$ (chaque élément de la base est appelé *une configuration*) forment une base complète orthonormée notée :

$$|\Phi_n\rangle = \prod_{k=1}^{n_p} \prod_{l=1}^{n_h} a_k^\dagger a_l |\Phi_0\rangle \quad (1.101)$$

où n est l'ordre d'excitation $|n_p n_h\rangle$.

1.4.3 Interaction δ

L'interaction résiduelle \hat{V}_{res} négligée dans l'approximation Hartree-Fock, contient en principe toutes les corrélations. Elle permet en général et dans la méthode HTDA d'étudier notamment les corrélations d'appariement [41] et les corrélations vibrationnelles [6]. Dans ce travail, nous limitons notre étude au traitement HTDA des corrélations d'appariement. Pour des raisons pratiques et/ou historiques, la plupart des forces effectives ne sont pas valables à la fois pour les canaux particule-trou et particule-particule. En principe elles n'ont pas à l'être d'ailleurs. En effet, la plupart des paramétrisations de Skyrme n'ont pas permis de reproduire les propriétés de type pp/tt . En revanche, la force de Gogny (pour sa paramétrisation courante actuelle [45]) donne de bons résultats dans les deux canaux. S. J. Krieger, P. Bonche, H. Flocard, P. Quentin et M. S. Weiss[46] ont utilisé une force de portée nulle (interaction delta) dans le cadre des calculs totalement microscopiques utilisant le formalisme HF+BCS pour l'étude des isomères de forme.

Cette force δ a été proposée il y a fort longtemps [47]. Elle correspond approximativement à la contribution de haute multipolarité du développement multipolaire de l'interaction résiduelle. Elle est bien connue pour engendrer de façon réaliste des corrélations d'appariements. Elle est également particulièrement adaptée pour le traitement HTDA des corrélations d'appariement (voir par exemple [3]). Dans notre travail nous utilisons la force de Skyrme (dans sa paramétrisation SIII ou SkM*) pour traiter la partie de Hartree-Fock et une force delta (S=0,T=1) indépendante de la densité comme interaction résiduelle.

Cette force delta s'écrit sous la forme :

$$\delta_\tau(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta_0^\tau \frac{1 - \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2}{4} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1.102)$$

où τ indique les différents états de charge, δ_0^τ représente l'intensité de la force alors que $\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$ sont les matrices de Pauli associées aux particules (1) et (2). Précisons maintenant un caractère important de cette force. On peut réécrire δ_τ à l'aide de l'opérateur de spin P^σ qui s'écrit en fonction de $\vec{\sigma}_1$ et $\vec{\sigma}_2$:

$$P^\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (1.103)$$

Il en résulte que :

$$\delta_\tau(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\delta_0^\tau}{2}(1 - P^\sigma)\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1.104)$$

Nous savons que l'interaction $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ n'agit que dans des états à deux fermions qui sont tels que $L = 0$ (états relatif s). Pour un tel système de deux fermions, le principe de Pauli stipule que :

$$(-)^{L+S+T} = -1 \quad (1.105)$$

où L , S et T sont les nombres quantiques relatifs orbitaux, de spin et d'isospin des deux nucléons. La conséquence est que pour deux nucléons de même type ($T = 1$) comme c'est le cas ici, les spins doivent être opposés ($S = 0$).

Avec cette force, le Hamiltonien exact (1.95) est remplacé par :

$$\hat{H}' = \hat{H}_{\text{HF}} - \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle + E_R + \hat{\delta} - \hat{\delta}_{\text{HF}} + \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \Phi_0 \rangle \quad (1.106)$$

ce qui revient à dire que l'interaction résiduelle est approchée par :

$$\hat{V}_{\text{res}} = \hat{\delta} - \hat{\delta}_{\text{HF}} + \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \Phi_0 \rangle \quad (1.107)$$

où $\hat{\delta}_{\text{HF}}$ est la réduction à 1 corp de $\hat{\delta}$ pour $|\Phi_0\rangle$ et on notera que $E_R(\hat{\delta}) = 0$.

1.4.4 Construction de la base $|npnh\rangle$

On va construire la base orthogonale à N corps dans laquelle on va diagonaliser le Hamiltonien à partir du vide $|\Phi_0\rangle$. Elle est schématisée par la Figure 1.3 où les lignes continues correspondent aux états individuels de Hartree-Fock, les lignes pointillées aux niveaux de Fermi, et les cercles (pleins) vides aux états (occupés) inoccupés. Nous avons imposé la symétrie axiale donc la projection k du moment angulaire total (troisième composante du moment angulaire) est un bon nombre quantique. Les niveaux sont caractérisés par leur énergie e_{HF}^i ainsi que par leur nombre quantique k_i . Par définition les états de trous (notés ici t) sont les états d'énergie au-dessous du niveau de Fermi ($e_i < e_F$), et les états de particules (notés par p) se trouvent

au-dessus du niveau de Fermi ($e_i > e_F$). Dans notre cas l'énergie de Fermi e_F est arbitrairement définie par la moyenne entre l'énergie du dernier état occupé et celle du premier état inoccupé. Par convention, nous attribuerons une valeur de k positive aux états de particules et de trous qui se trouvent à gauche dans les diagrammes et une valeur de k négative à ceux qui sont situés à droite. Cette représentation est effectuée pour un seul type de nucléons (neutron ou proton), il faudrait la doubler en tenant compte des deux types de nucléons.

La construction de la base à N corps, pour un état K donné (ici $K = 0$) de neutrons ou de protons est le résultat d'excitation de type $|npnh\rangle$ à partir d'un déterminant de Slater solution de Hartree-Fock. Dans les noyaux pair-pairs, avec un état fondamental $K = 0$, cette base contient :

+ le déterminant de Slater $|\Phi_0\rangle$ correspondant à un état $|0p0h\rangle$ qui est pair par renversement du sens du temps.

+ les configurations $|1p1h\rangle$ caractérisées par l'excitation d'une particule d'un état de trou k_t vers un état de particule k_p . Ce type d'excitation n'est possible que si :

$$K = k_p - k_t \quad (1.108)$$

+ les configurations $|2p2h\rangle$ résultats d'excitations de deux particules des états de trous k_{t1} et k_{t2} , vers les états de particules k_{p1} et k_{p2} . Ces excitations sont permises si :

$$K = (k_{p1} + k_{p2}) - (k_{t1} + k_{t2}) \quad (1.109)$$

+ ...

+ de façon générale les configurations $|npnh\rangle$ résultats d'excitations de n particules des états de trous k_{t1}, k_{t2}, \dots , et k_{tn} vers les états de particules k_{p1}, k_{p2}, \dots , et k_{pn} . Ces excitations sont permises si :

$$K = \sum_{i=1,n} (k_{p_i} - k_{t_i}) \quad (1.110)$$

1.4.5 Troncature de la base à N corps

Les états à N corps des noyaux pair-pairs de la base ne sont pas en général des états pairs pour l'opérateur renversement du sens du temps \hat{T} . Pour restaurer la symétrie suivant \hat{T} , nous pouvons par exemple projeter ces configurations sur des états pairs sous \hat{T} par la méthode PAV pour former une nouvelle base dans laquelle on va diagonaliser le Hamiltonien \hat{H} . Les états projetés s'écrivent :

$$|\Phi_i^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\Phi_i\rangle \pm \hat{T}|\Phi_i\rangle] \quad (1.111)$$

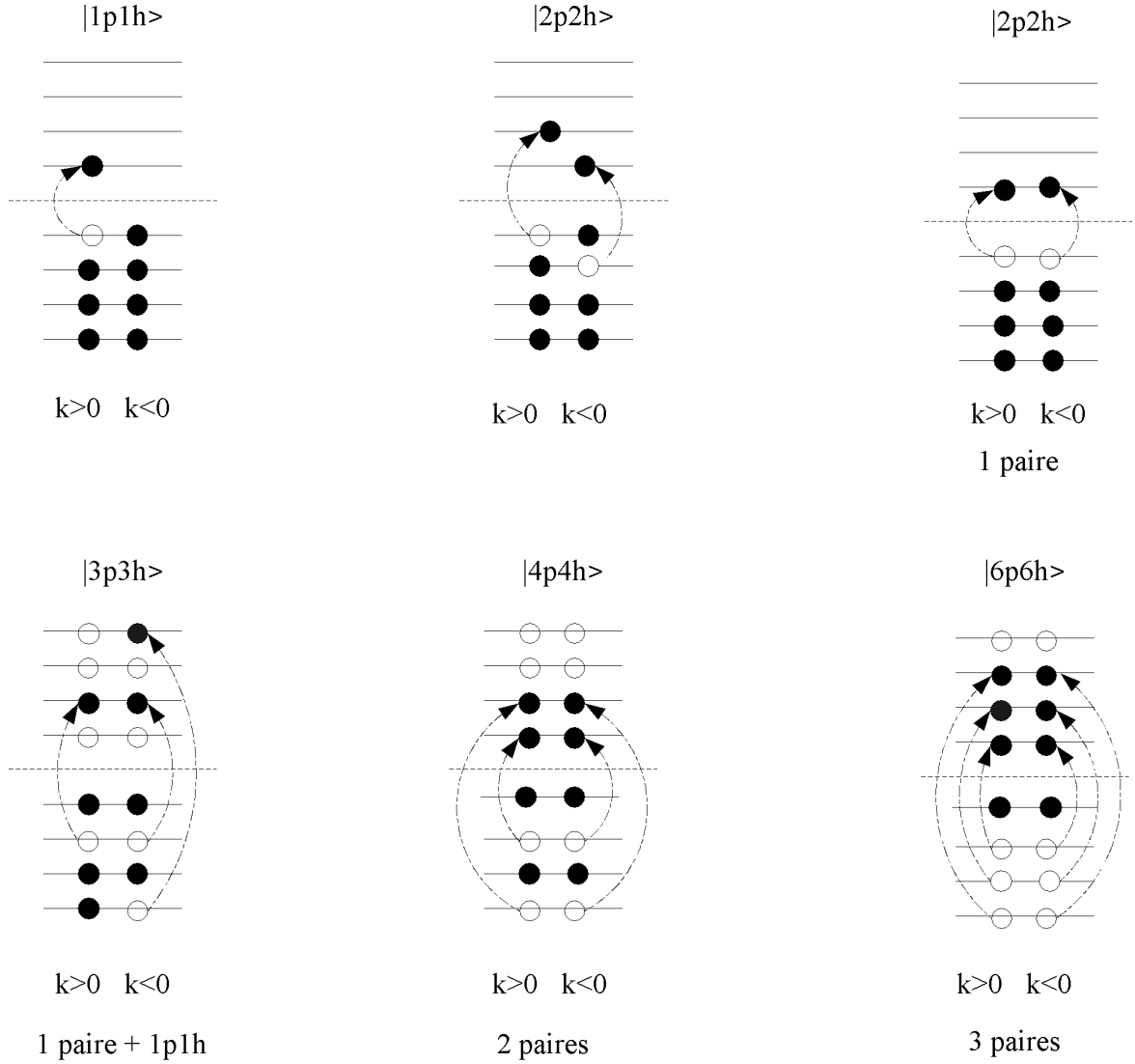


FIGURE 1.3 – Quelques exemples d'excitations $|npnh\rangle$

En plus, nous savons que :

$$\langle i|\bar{j}\rangle = 0 \quad \text{avec} \quad |\bar{j}\rangle = \hat{T}|j\rangle \quad (1.112)$$

ce qui assure que la nouvelle base des états à N corps est orthogonale :

$$\langle \Phi_i^+ | \Phi_j^+ \rangle = \delta_{ij} \quad (1.113)$$

Pour un noyau pair-pair nous n'aurons à considérer que les états pairs sous \hat{T} . Certaines configurations sont paires par renversement du sens du temps dans cette base. Ce sont les transferts d'une, deux, trois,... paires, états correspondant à des diffusions de paires de particules appartenant à deux états dégénérés de Kramers de type trou vers des paires d'orbitales dégénérées de Kramers de type particule (cf. annexe C). Dans le cas de l'état fondamental d'un noyau

pair-pair, d'après les études des références [41, 4], la composante la plus importante de l'état corrélé HTDA correspond le plus souvent à la configuration 0p0h. De façon très cohérente avec la théorie de BCS, il a aussi été montré que l'essentiel des corrélations est dominé par les corrélations d'appariement décrites par ces paires (notamment la diffusion d'une paire). Dans nos études, nous ne considérons que l'état $|\Phi_0\rangle$ et des états de transfert de paires, ignorant donc les configurations non symétriques par renversement du sens du temps pour construire la base à N corps. De cette façon, nous aurons directement une base qui est paire par renversement du sens du temps (cf. annexe C).

Bien que cette base soit déjà tronquée, sa taille est encore très grande. Ceci rend la matrice du Hamiltonien impossible à diagonaliser si nous prenions en compte tous les états de particule et de trou. Nous devons effectuer une autre troncature comme dans le modèle en couches. Pour ce faire, on se limite à considérer un espace de valence qui par définition correspond à l'ensemble des états individuels supposés être importants pour le traitement des corrélations. Cette troncature est fixée par un paramètre X ($X > 0$), qui détermine que l'on retient tous les états individuels situés autour du niveau de Fermi e_F , dans une fenêtre d'énergie $[e_F - X, e_F + X]$. Le paramètre X doit être compris comme un paramètre de l'interaction (plus X est grand, plus l'espace de valence est grand et plus l'énergie de corrélation est grande en valeur absolue) qui influe sur la valeur réaliste de l'intensité de l'interaction résiduelle.

Un facteur correctif [41] sur les états individuels a été ajouté pour d'adoucir l'effet brusque de la coupure sur les états individuels qui se trouvent au voisinage des énergies de cut-off ($e_F \pm X$). Il tend vers 0 pour les états individuels situés au delà de la fenêtre, et il vaut ~ 1 pour les états qui sont proches du niveau de Fermi. Il est défini par :

$$f_i^2 = \frac{1 + e^{\frac{-X}{\mu}}}{1 + e^{\frac{|e_{\text{HF}}^i - e_F| - X}{\mu}}} \quad (1.114)$$

où μ représente la largeur de la fonction f_i (de valeur positive). Les éléments de matrice d'interaction sont multipliés par ce facteur de coupure :

$$\langle ij|\hat{V}|\tilde{k}\tilde{l}\rangle' = f_i f_j f_k f_l \langle ij|\hat{V}|\tilde{k}\tilde{l}\rangle \quad (1.115)$$

1.4.6 Calcul des éléments de matrice

La base étant construite, il nous reste à calculer les éléments de matrice du Hamiltonien \hat{H} dans cette base :

$$\hat{H}_{ij} = \langle \Phi_i|\hat{H}|\Phi_j\rangle = \left(\langle \Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle + E_{\text{p-h}}^{(i)} \right) \delta_{ij} + \langle \Phi_i|\hat{V}_{\text{res}}|\Phi_j\rangle \quad (1.116)$$

où

$$E_{\text{p-h}}^{(i)} = \sum_p e_p^i - \sum_h e_h^i \quad (1.117)$$

est l'énergie d'excitation particule-trou de l'état à N corps $|\Phi_i\rangle$ (qui est un état propre de \hat{H}_{HF}) par rapport au déterminant de Slater de plus basse énergie $|\Phi_0\rangle$. Cette énergie contribue seulement dans les éléments diagonaux. Ceci nous amène donc à calculer les éléments de matrice :

$$\langle \Phi_i | \hat{\Theta} | \Phi_j \rangle \quad (1.118)$$

avec un opérateur $\hat{\Theta}$ qui est à un ou à deux corps. Ce calcul joue un rôle important dans le formalisme de la méthode HTDA. Il s'applique dans les calculs des éléments de matrice de l'interaction résiduelle, de la matrice densité ρ , des quantités physiques décrites par des observables à un corps telles que le rayon de charge ou la déformation quadrupolaire d'un état corrélé HTDA ... Ces éléments de matrice sont calculés au moyen d'une généralisation du théorème de Wick faible [53].

1.4.7 Méthode du vide relatif

Dans la première version des calculs HTDA [41], on a exprimé les états $|\Phi_i\rangle$ en fonction des opérateurs de création et d'annihilation agissant sur le vide $|\Phi_0\rangle$. Ceci conduit à des formules très longues, peu générales et difficiles à utiliser. Pour étendre l'usage de cette approche aux noyaux pair-impairs ou impairs-impairs, dans la référence [4] on a utilisé une méthode consistant à utiliser un vide relatif. Nous allons résumer les points importants de cette méthode.

L'état fondamental Hartree-Fock du système $|\Phi_0\rangle$ est le quasi-vide. Des déterminants de Slater $|\mathbf{A}\rangle, |\mathbf{B}\rangle$ (qui sont des configurations $|\Phi_i\rangle$) seront construits à partir du vide $|\Phi_0\rangle$ par des excitations particule-trou. Pour calculer l'élément de matrice d'un opérateur entre deux déterminants de Slater $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\mathbf{B}\rangle$, on prend $|\mathbf{A}\rangle$ comme ce vide relatif et on exprime $|\mathbf{B}\rangle$ en fonction de $|\mathbf{A}\rangle$.

+ Pour le recouvrement :

- Si $|\mathbf{B}\rangle = |\mathbf{A}\rangle$

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{A} \rangle = 1 \quad (1.119)$$

- Si $|\mathbf{B}\rangle$ diffère de $|\mathbf{A}\rangle$

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle = 0 \quad (1.120)$$

+ Pour un opérateur à un corps :

$$\Theta = \sum_{ij} \langle i|\theta|j\rangle a_i^\dagger a_j \quad (1.121)$$

- Si $|\mathbf{B}\rangle = |\mathbf{A}\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A}|\Theta|\mathbf{A}\rangle &= \sum_{ij} \langle i|\theta|j\rangle \langle \mathbf{A}|a_i^\dagger a_j|\mathbf{A}\rangle = \sum_{ij} \langle i|\theta|j\rangle \delta_{ij}^{t_{\mathbf{A}}} \\ &= \sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \langle i|\theta|i\rangle \end{aligned} \quad (1.122)$$

La notation $t_{\mathbf{A}}$ indique la somme finale porte sur tous les états occupés par rapport à $|\Phi_0\rangle$ du vide relatif $|\mathbf{A}\rangle$. L'ensemble des états occupés de $|\mathbf{A}\rangle$ est obtenu à partir de celui du vide $|\Phi_0\rangle(t_{\Phi_0})$

$$\sum^{t_{\mathbf{A}}} = \sum^{t_{\Phi_0}} - \sum^{t_{\Phi_0}(\mathbf{A})} + \sum^{p_{\Phi_0}(\mathbf{A})} \quad (1.123)$$

où $t_{\Phi_0}(\mathbf{A})$ et $p_{\Phi_0}(\mathbf{A})$ sont les états de trous et de particules de l'état $|\mathbf{A}\rangle$ par rapport au vide $|\Phi_0\rangle$, donc

$$\langle \mathbf{A}|\Theta|\mathbf{A}\rangle = \left[\sum_i^t - \sum_i^{t(\mathbf{A})} + \sum_i^{p(\mathbf{A})} \right] \langle i|\theta|i\rangle \quad (1.124)$$

- Si $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A}|\Theta|\mathbf{B}\rangle &= \sum_{ij} \langle i|\theta|j\rangle \langle \mathbf{A}|a_i^\dagger a_j a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle = \sum_{ij} \langle i|\theta|j\rangle \delta_{iy}^{t_{\mathbf{A}}} \delta_{jy'}^{p_{\mathbf{A}}} \\ &= \langle y|\theta|y'\rangle \end{aligned} \quad (1.125)$$

- Si $|\mathbf{B}\rangle$ diffère de $|\mathbf{A}\rangle$ par plus d'un nucléon, on aura :

$$\langle \mathbf{A}|\Theta|\mathbf{B}\rangle = 0 \quad (1.126)$$

+ Pour un opérateur à deux corps

$$\Theta = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{\theta}_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (1.127)$$

où $\tilde{\theta}_{ijkl}$ dénote l'élément de matrice antisymétrisé de Θ .

- Si $|\mathbf{B}\rangle = |\mathbf{A}\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B} \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{\theta}_{ijkl} \langle \mathbf{A} | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \mathbf{A} \rangle = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{\theta}_{ijkl} (\delta_{ik}^{t\mathbf{A}} \delta_{jl}^{t\mathbf{A}} - \delta_{il}^{t\mathbf{A}} \delta_{jk}^{t\mathbf{A}}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{ij}^{t\mathbf{A}} \tilde{\theta}_{ijij} = \frac{1}{2} \sum_i^{t\mathbf{A}} \sum_j^{t\mathbf{A}} \tilde{\theta}_{ijij}
\end{aligned} \tag{1.128}$$

- Si $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B} \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{\theta}_{ijkl} \langle \mathbf{A} | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \mathbf{A} \rangle \\
&= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{\theta}_{ijkl} [\delta_{iy}^{t\mathbf{A}} (\delta_{jl}^{t\mathbf{A}} \delta_{ky'}^{p\mathbf{A}} - \delta_{jk}^{t\mathbf{A}} \delta_{ly'}^{p\mathbf{A}}) + \delta_{jy}^{t\mathbf{A}} (\delta_{ik}^{t\mathbf{A}} \delta_{ly'}^{p\mathbf{A}} - \delta_{il}^{t\mathbf{A}} \delta_{ky'}^{p\mathbf{A}})] \\
&= \sum_i^{t\mathbf{A}} \tilde{\theta}_{iyyiy'}
\end{aligned} \tag{1.129}$$

- Si $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_{z'}^\dagger a_y a_z |\mathbf{A}\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B} \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{\theta}_{ijkl} \langle \mathbf{A} | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k a_{y'}^\dagger a_{z'}^\dagger a_y a_z | \mathbf{A} \rangle \\
&= \tilde{\theta}_{yzz'y'}
\end{aligned} \tag{1.130}$$

- Si $|\mathbf{B}\rangle$ diffère de $|\mathbf{A}\rangle$ par plus de deux nucléons, on aura :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B} \rangle = 0 \tag{1.131}$$

Les éléments diagonaux

Dans ce cas, $|\Phi_i\rangle \equiv |\Phi_j\rangle$ et l'équation (1.116) devient :

$$\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + E_{\text{p-h}}^{(i)} + \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_i \rangle \tag{1.132}$$

d'après l'équation (1.122) et (1.128) on a :

$$\langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_i \rangle = \frac{1}{2} \left[\sum_{kl}^{t(\Phi_i)} + \sum_{kl}^{p(\Phi_i)} - 2 \sum_k^{t(\Phi_i)} \sum_l^{p(\Phi_i)} \right] \langle kl | \hat{V} | \tilde{k}l \rangle \tag{1.133}$$

où les sommations $\sum_k^{t(\Phi_i)}$ et $\sum_k^{p(\Phi_i)}$ portent sur tous les états de trous et de particules de $|\Phi_i\rangle$ par rapport à $|\Phi_0\rangle$ respectivement. Dans le cas $|\Phi_i\rangle \equiv |\Phi_0\rangle$, en utilisant (1.100) on obtient les éléments de matrice diagonaux de \hat{H} dans l'état $|\Phi_0\rangle$:

$$H_{00} = \langle \Phi_0 | \hat{H}_{\text{HF}} | \Phi_0 \rangle \tag{1.134}$$

Donc nous obtenons une formule générale pour \hat{H} dans n'importe quel l'état $|\Phi_i\rangle$:

$$H_{ii} = H_{00} + E_{p-h}^{(i)} + \frac{1}{2} \left[\sum_{kl}^{t(\Phi_i)} + \sum_{kl}^{p(\Phi_i)} - 2 \sum_k^{t(\Phi_i)} \sum_l^{p(\Phi_i)} \right] \langle kl | \hat{V} | \widetilde{kl} \rangle \quad (1.135)$$

Les éléments de matrice non-diagonaux

L'interaction résiduelle étant consituée d'opérateurs à un et deux corps, les éléments de matrice H_{ij} sont nuls si $|\Phi_i\rangle$ diffère de $|\Phi_j\rangle$ par plus de deux nucléons. En conséquence, nous ne considérons que les deux cas suivants :

+ Si $|\Phi_i\rangle$ diffère de $|\Phi_j\rangle$ par un nucléon : $|\Phi_j\rangle = \varepsilon a_y^\dagger a_y |\Phi_i\rangle$. (dans ce qui suit, nous considérons arbitrairement mais pour simplifier l'écriture des équations que la phase ε est égale à +1). L'élément de matrice de \hat{U}_{HF} est égal :

$$\langle \Phi_i | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_j \rangle = \langle y | \hat{u}_{\text{HF}} | y' \rangle = \sum_k^t \langle ky | \hat{v} | \widetilde{ky'} \rangle \quad (1.136)$$

Quant à l'opérateur à deux corps \hat{V} , on utilise l'équation (1.129) :

$$\langle \Phi_i | \hat{V} | \Phi_j \rangle = \left[\sum_k^t + \sum_k^{p(\Phi_i)} - \sum_k^{t(\Phi_i)} \right] \langle ky | \hat{v} | \widetilde{ky'} \rangle \quad (1.137)$$

En combinant les deux équations (1.136) et (1.137) nous trouvons les éléments de matrice non-diagonaux :

$$H_{ij} = \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle = \left[\sum_k^{p(\Phi_i)} - \sum_k^{t(\Phi_i)} \right] \langle ky | \hat{v} | \widetilde{ky'} \rangle \quad (1.138)$$

+ Si $|\Phi_i\rangle$ diffère de $|\Phi_j\rangle$ par deux nucléons : $|\Phi_j\rangle = a_{y'}^\dagger a_{z'}^\dagger a_y a_z |\Phi_i\rangle$. Dans ce cas, on utilise l'équation (1.126)

$$\langle \Phi_i | \hat{U}_{\text{HF}} | \Phi_j \rangle = 0 \quad (1.139)$$

et l'équation (1.130)

$$\langle \Phi_i | \hat{v} | \Phi_j \rangle = \langle yz | \hat{v} | \widetilde{z'y'} \rangle \quad (1.140)$$

L'élément de matrice $H_{ij}^{(1)}$ s'écrit donc dans ce cas :

$$H_{ij} = \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle = \langle yz | \hat{v} | \widetilde{z'y'} \rangle \quad (1.141)$$

1.4.8 Diagonalisation

Résoudre l'équation de Schrödinger dans la base à N corps nous conduit à diagonaliser un Hamiltonien hermitique \hat{H}' :

$$\hat{H}' = \hat{H}_{\text{IQP}} + \hat{V}_{\text{res}} \quad (1.142)$$

où la matrice de l'opérateur \hat{H}' dans cette base :

$$H'_{ij} = \langle \Phi_i | \hat{H}' | \Phi_j \rangle = E_{\text{p-h}}^{(i)} + \langle \Phi_i | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_j \rangle \quad (1.143)$$

est symétrique et s'écrit sous la forme donnée dans la Figure 1.4.

	0h0p	2h2p	4h4p	...
0h0p	H'_{00}	H'_{02}	H'_{04}	...
2h2p	H'_{20}	H'_{22}	H'_{24}	...
4h4p	H'_{40}	H'_{42}	H'_{44}	...
...

FIGURE 1.4 – Matrice de diagonalisation

La méthode de diagonalisation traditionnelle du Hamiltonien de Hartree-Fock à chaque itération (recherche de tous les vecteurs propres et les valeurs propres associées) dans le calcul Hartree-Fock est inadaptée parce que la taille de la base à diagonaliser est beaucoup trop grande. En plus, nous ne sommes pas intéressés par tout le spectre, mais seulement par les états propres les plus bas en énergie. Nous utilisons donc un outil couramment employé dans les calculs de modèle en couches qui est l'algorithme de Lanczös (ici avec un code développé par B. N. Parlett et D. S. Scott [48]).

L'état propre HTDA le plus bas en énergie est l'état fondamental corrélé $|\Psi\rangle$, qui est une combinaison linéaire des déterminants de Slater (ayant un bon nombre de particules). Il se décompose sur la base orthonormée d'états à N corps :

$$|\Psi\rangle = \chi_0 |\Phi_0\rangle + \sum_{1\text{p}1\text{h}} \chi_1 |\Phi_1\rangle + \sum_{2\text{h}2\text{p}} \chi_2 |\Phi_2\rangle + \dots \quad (1.144)$$

Le carré des coefficients réels χ_i représente la probabilité que le système se trouve dans l'état à N particules $|\Phi_i\rangle$, avec la condition qui assure la normalisation de l'état corrélé $|\Psi\rangle$, soit :

$$\sum_i \chi_i^2 = 1 \quad (1.145)$$

L'orthonormalité de la base à N corps et la condition (1.145) conduit à ce que :

$$\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle = N \quad (1.146)$$

Comme les configurations ne sont pas des états de bonne parité, la fonction d'onde corrélée $|\Psi\rangle$ n'a pas une parité bien déterminée.

L'énergie totale E_{HTDA} du système est par définition la valeur moyenne de \hat{H} pour l'état corrélé $|\Psi\rangle$:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E_{\text{HTDA}} \quad (1.147)$$

L'énergie de corrélation E_{corr} est par définition la différence de la valeur moyenne du Hamiltonien \hat{H} pour l'état corrélé (E_{HTDA}) et sa valeur moyenne dans le vide $|\Phi_0\rangle$ est :

$$E_{\text{corr}} = E_{\text{HTDA}} - \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle \quad (1.148)$$

1.4.9 Mesure de la diffusivité de la surface de Fermi

Pour mesurer le degré de corrélation du système, on pourrait songer à utiliser l'énergie de corrélation. Cependant, compte tenu du caractère non auto-cohérent de l'interaction effective employée (Skyrme ou delta suivant le canal ph ou pp/hh), ceci n'aurait aucun sens physique. Il est utile de définir une quantité qui peut caractériser plus valablement ce degré de corrélation, c'est la somme S :

$$S = \text{Tr}(\rho^{1/2}(1 - \rho)^{1/2}) = \sum_i u_i v_i \quad (1.149)$$

où u_i et v_i représentent respectivement les amplitudes de probabilité d'occupation et d'in-occupation d'un état à une particule qui jouent le même rôle que les quantités u_i et v_i des approches usuelles de type BCS comme (1.87). Ces paramètres sont définis à partir de la matrice densité réduite $\hat{\rho}$ dans la base canonique (où celle-ci est diagonale) par :

$$v_i = \sqrt{\rho_{ii}} \quad u_i = \sqrt{1 - v_i^2} \quad (1.150)$$

En l'absence de corrélations, v_i^2 est égal soit à 0, soit à 1. La somme S y est donc nulle. Plus cette quantité est grande, plus les corrélations du système sont fortes.

1.4.10 Calcul auto-cohérent

On peut rendre l'approche HTDA auto-cohérente (mais non variationnelle) de façon analogue à ce qui est fait dans le traitement des corrélations d'appariement de l'approximation BCS. Le processus correspondant est illustrée dans la Figure 1.5. Un calcul champ moyen Hartree-Fock auto-cohérent ou un calcul de HF+BCS nous fournit un champ moyen et donc un déterminant de Slater $|\Phi_0^{(0)}\rangle$, qui est l'état de référence. Appliquant la méthode HTDA nous obtenons l'état fondamental corrélé $|\Psi\rangle$ d'énergie E . Cette fonction d'onde permet de calculer la densité réduite à un corps $\hat{\rho}$ dont les éléments de matrice sont définis dans la base de Hartree-Fock par :

$$\rho_{ij} = \langle i|\hat{\rho}|j\rangle = \langle\Psi|a_j^\dagger a_i|\Psi\rangle \quad (1.151)$$

Cette densité $\hat{\rho}$ ainsi calculée est convoluée avec le potentiel effectif pour construire un nouveau champ moyen. La diagonalisation du Hamiltonien de champ moyen nous fournit un nouveau vide $|\Phi_0\rangle$, à partir duquel on construit une nouvelle base d'états à N corps. On va appliquer la méthode HTDA sur cette base pour obtenir une nouvelle fonction d'onde corrélée $|\Psi\rangle$. Cette fonction d'onde $|\Psi\rangle$ est utilisée pour recalculer une nouvelle matrice densité $\hat{\rho}$ via (1.151) et ainsi de suite jusqu'à convergence du processus. La condition de convergence porte sur la différence pour E , Q_{20} et Q_{40} entre les deux dernières itérations qui doit être inférieure à une certaine limite, par exemple à 10^{-6}MeV , 10^{-2}b et 10^{-2}b^2 respectivement. A l'issue d'un calcul auto-cohérent, nous aurons ainsi incorporé dans le champ moyen tous les effets des corrélations du système sur les propriétés à un corps.

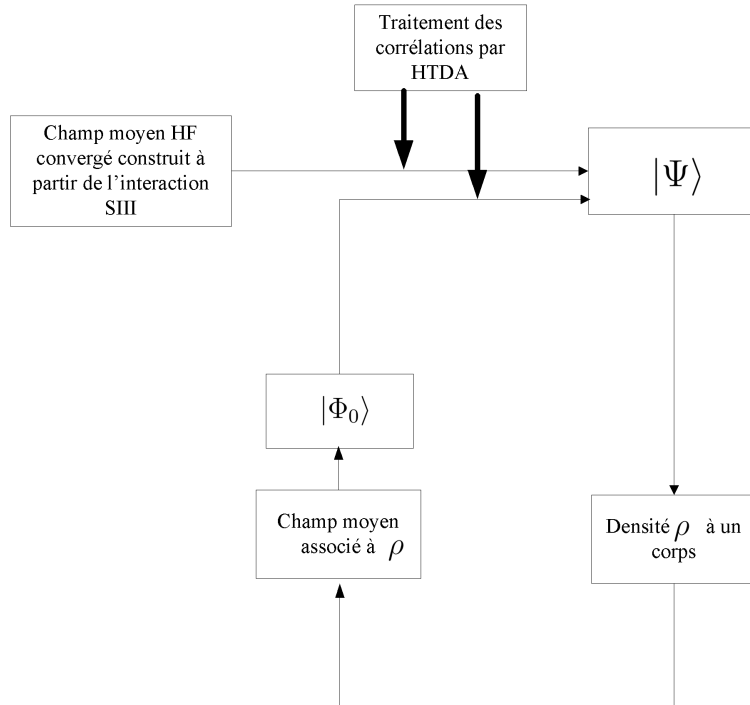


FIGURE 1.5 – Calcul HTDA auto-cohérent

CHAPITRE 2

Mélange de configuration

2.1 Introduction

Dans le cadre de l'approximation de Hartree-Fock, nous avons exploité le sous-ensemble de l'espace de Hilbert des déterminants de Slater. La forme simple des fonctions d'essai ne tient compte en effet que des corrélations liées au principe de Pauli. Elle brise souvent les symétries du Hamiltonien effectif du système. Dans notre travail la symétrie de parité est parfois brisée par les déterminants de Slater considérés. Pour inclure les corrélations d'appariement dans le cadre de la méthode HTDA, la fonction d'onde corrélée $|\Psi\rangle$ est définie par un mélange de déterminants de Slater. Il est clair qu'en général cette nouvelle fonction d'onde va briser la symétrie considérée quand elle est la somme d'états non symétriques. Cette symétrie peut être restaurée par la projection de la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ sur un sous-espace où cette symétrie est conservée. Cette restauration est nécessaire pour deux raisons. Tout d'abord, l'état intrinsèque $|\Psi\rangle$ dans le repère attaché aux axes principaux du noyau n'est pas en général un état physique. En plus, un tel défaut entraîne une erreur importante qui peut être de l'ordre de quelques MeV (ainsi qu'on le verra plus loin dans notre cas) sur la variation de l'énergie du noyau en fonction des variables collectives. La technique de restauration utilisée nous a conduit à calculer des éléments de matrice entre deux déterminants de Slater différents : $\langle\Phi|\hat{\Theta}|\Psi\rangle$. L'approche de Löwdin nous permet de calculer de tels types d'éléments de matrice.

2.2 Théorème de Löwdin

Le théorème de Löwdin est en fait la généralisation du théorème de Wick. Il permet de calculer les éléments de matrice entre deux déterminants de Slater quelconques $|\Phi\rangle$ et $|\Psi\rangle$, notamment en introduisant le concept de matrice densité mixte. Comme on le sait la matrice densité réduite à 1 corps associée à un seul déterminant de Slater permet de décrire le système à l'approximation Hartree-Fock. En 1955 [49], Löwdin a proposé de décrire un système de façon plus générale en définissant une série de matrices densités mixtes associées à un couple quelconque de fonctions d'onde totales du système. Dans le cas simple où les fonctions d'onde totales sont approchées par des déterminants de Slater, les matrices densités mixtes d'ordre N de cette série peuvent être développées en fonction de matrices d'ordre 1 (qui constituent, comme on va le voir, les matrices densités mixtes réduites à 1 corps). Ce travail a été généralisé par R. Balian et E. Brezin [51] dans le cas où $|\Phi\rangle$ et $|\Psi\rangle$ sont des vides de quasi-particules de Bogoliubov.

2.2.1 Méthode des mineurs

Considérons une quantité physique associée à un système de N particules et représentée par un opérateur hermitique Θ_{op} (une observable) à plusieurs corps dont chaque terme est invariant sous une permutation quelconque des indices des particules interagissantes. Supposons donc qu'il s'écrive comme une somme de termes faisant intervenir de façon symétrique et indépendante des indices les quantités dynamiques d'une particule ou d'un couple de particules ou d'un triplet de particules, ... :

$$\Theta_{\text{op}} = \Theta_{(0)} + \sum_i^N \theta_i + \frac{1}{2!} \sum_{i \neq j=1}^N \theta_{ij} + \frac{1}{3!} \sum_{i \neq j \neq k=1}^N \theta_{ijk} + \dots \quad (2.1)$$

Soient maintenant deux déterminants de Slater Φ et Ψ notés de façon abrégée par :

$$\begin{aligned} \Phi &= (N!)^{-\frac{1}{2}} \det\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\} \\ \Psi &= (N!)^{-\frac{1}{2}} \det\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Ces déterminants de Slater sont construits respectivement à partir de deux jeux séparément orthonormés d'états $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ et $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\}$ ($\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$, $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$). Ces jeux ne sont pas nécessairement orthonormés entre eux, donc pour chaque couple (ϕ_k, ψ_l) , le produit scalaire $d_{kl} = \langle \phi_k | \psi_l \rangle$ peut être différent de zéro pour $k \neq l$. Le recouvrement entre les deux déterminants de Slater est défini par :

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = N! \langle \Phi_0 | \hat{\mathcal{A}}^\dagger \hat{\mathcal{A}} | \Psi_0 \rangle \quad (2.3)$$

où $|\Phi_0\rangle, |\Psi_0\rangle$ dénotent les états non antisymétrisés correspondants et où $\hat{\mathcal{A}}$ est l'opérateur d'antisymétrisation défini par $\hat{\mathcal{A}} = \frac{1}{N!} \sum_P (-)^P \hat{P}$ où la somme porte sur les $N!$ permutations de N indices dont la signature est notée par $(-)^P$. En utilisant l'hermiticité et l'idempotence de l'opérateur $\hat{\mathcal{A}}$ nous obtenons :

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = N! \langle \Phi_0 | \hat{\mathcal{A}} | \Psi_0 \rangle = \sum_P (-)^P \langle \Phi_0 | \hat{P} | \Psi_0 \rangle = \sum_P (-)^P \prod_k^N \langle \phi_k | \psi_{P(k)} \rangle \quad (2.4)$$

On reconnaît ici une forme complètement antisymétrique du produit de deux jeux de N quantités $\{\langle \phi_k | \psi_l \rangle\}$. C'est donc le déterminant de la matrice $\mathbf{d} = (d_{kl})_{N \times N}$, soit pour présenter nos notations

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \det(\mathbf{d}) = D_{\Phi\Psi} \quad (2.5)$$

La valeur non nécessairement nulle de $D_{\Phi\Psi}$ illustre la « non-orthogonalité » a priori de ces deux déterminants de Slater. On note les mineurs d'ordres 1, 2, 3, ... à partir ce déterminant par :

$$D_{\Phi\Psi}(k|l), D_{\Phi\Psi}(k_1 k_2 | l_1 l_2), D_{\Phi\Psi}(k_1 k_2 k_3 | l_1 l_2 l_3), \dots \quad (2.6)$$

On rappelle que les mineurs d'une matrice sont définis comme étant des déterminants de sous-matrices particulières. Par exemple, pour la matrice carrée $\mathbf{d} = (d_{kl})_{N \times N}$ de taille N , on appelle mineur d'ordre p ($1 \leq p < N$) le déterminant d'une sous-matrice carrée de taille $N - p$ obtenue en supprimant p lignes et p colonnes de la matrice \mathbf{d} . Chaque mineur est défini avec un facteur de phase réel (donc un signe $+$ ou $-$) dont le produit avec le mineur considéré est appelé co-facteur. Par exemple, le mineur d'ordre 1 noté $D_{\Phi\Psi}(k|l)$ (cf. Figure 2.1) est obtenu en enlevant la ligne numéro k et la colonne numéro l . Il est associé avec un facteur égal à $(-1)^{k+l}$. Dans le cas d'ordre 2 noté $D_{\Phi\Psi}(k_1 k_2 | l_1 l_2)$ ce facteur est $(-1)^{k_1+k_2+l_1+l_2}$ où (k_1, k_2) et (l_1, l_2) sont les lignes et les colonnes enlevées respectivement.

$$D_{\Phi\Psi}(k|l) = \begin{array}{c} \text{Ligne } k \\ \begin{array}{c} \left| \begin{array}{cccccccc} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & \dots & d_{1k} & \dots & d_{1N} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & \dots & d_{2k} & \dots & d_{2N} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & \dots & d_{3k} & \dots & d_{3N} \\ d_{41} & d_{42} & d_{43} & d_{44} & \dots & d_{4k} & \dots & d_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{k1} & d_{k2} & d_{k3} & d_{k4} & \dots & d_{kk} & \dots & d_{kN} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{N1} & d_{N2} & d_{N3} & d_{N4} & \dots & d_{Nk} & \dots & d_{NN} \end{array} \right| \end{array} \end{array}$$

 FIGURE 2.1 – Mineur d'ordre un $D_{\Phi\Psi}(k|l)$

Dans le cas très particulier où on considère le mineur d'ordre N d'une matrice de taille N nous utilisons la convention suivante : ce mineur est égal au produit des signatures des permutations qui font passer dans chacun des deux ensembles d'indices présents dans $D_{\Phi\Psi}(k_1, \dots, k_N | l_1, \dots, l_N)$, i.e pour les k_i et les l_i , de l'ordre lexicographique à l'ordre considéré. Par exemple pour $N = 2$, le mineur $D_{\Phi\Psi}(1, 2 | 1, 2) = 1$ et le mineur $D_{\Phi\Psi}(2, 1 | 1, 2) = -1$, etc.

Löwdin [49] a montré que les éléments de matrice entre deux déterminants de Slater peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | \Theta_{\text{op}} | \Psi \rangle &= \Theta_{(0)} D_{\Phi\Psi} + \sum_{k \neq l} (-)^{k+l} \langle k | \theta_1 | l \rangle D_{\Phi\Psi}(k|l) \\
&+ \frac{1}{2!} \sum_{\substack{k_1 \neq k_2 \\ l_1 \neq l_2}} (-)^{k_1+k_2+l_1+l_2} \langle k_1 k_2 | \theta_{12} | l_1 l_2 \rangle D_{\Phi\Psi}(k_1 k_2 | l_1 l_2) \\
&+ \frac{1}{3!} \sum_{\substack{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \\ l_1 \neq l_2 \neq l_3}} (-)^{k_1+k_2+k_3+l_1+l_2+l_3} \langle k_1 k_2 k_3 | \theta_{123} | l_1 l_2 l_3 \rangle D_{\Phi\Psi}(k_1 k_2 k_3 | l_1 l_2 l_3) \\
&+ \dots,
\end{aligned} \tag{2.7}$$

avec

$$\begin{aligned}
\langle k | \theta_1 | l \rangle &= \int \phi_k^*(\mathbf{x}_1) \theta_1 \psi_l(\mathbf{x}_1) dx_1 \\
\langle k_1 k_2 | \theta_{12} | l_1 l_2 \rangle &= \int \phi_{k_1}^*(\mathbf{x}_1) \phi_{k_2}^*(\mathbf{x}_1) \theta_{12} \psi_{l_1}(\mathbf{x}_1) \psi_{l_2}(\mathbf{x}_2) dx_1 dx_2,
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Il est important de noter qu'ici la notation $\langle k_1 k_2 | \theta_{12} | l_1 l_2 \rangle$ correspond à l'élément de matrice non-antisymétrisé.

2.2.2 Matrice densité mixte

Définition

Les déterminants de Slater (2.2) sont invariants à une phase près sous une transformation unitaire pour les seuls états occupés (ce ne serait pas vrai pour des transformations unitaires arbitraires). Considérons deux telles transformations unitaires **a** et **b** dont l'effet sur les fonctions d'onde individuelles occupées s'écrit comme :

$$|\bar{\phi}_k\rangle = \sum_{\alpha=1}^N |\phi_\alpha\rangle a_{\alpha k}, \quad \text{et} \quad |\bar{\psi}_l\rangle = \sum_{\beta=1}^N |\psi_\beta\rangle b_{\beta l} \tag{2.9}$$

Les déterminants de Slater $|\bar{\Phi}\rangle$ et $|\bar{\Psi}\rangle$ construits à partir des états à 1 corps résultant de ces transformations sont :

$$\langle \{\mathbf{r}_\alpha\} | \bar{\Phi} \rangle = \eta_a \langle \{\mathbf{r}_\alpha\} | \Phi \rangle, \quad \text{et} \quad \langle \{\mathbf{r}_\beta\} | \bar{\Psi} \rangle = \eta_b \langle \{\mathbf{r}_\beta\} | \Psi \rangle \tag{2.10}$$

On a donc $\bar{D}_{\Phi\Psi} = \eta_a \eta_b D_{\Phi\Psi}$ où η_a et η_b sont des nombres complexes de norme 1 (donc de la forme $e^{i\varphi_a}, e^{i\varphi_b}$). Les éléments des matrices $\bar{\mathbf{d}}$ et $\bar{\mathbf{d}}^{-1}$ résultant de ces transformations s'écrivent donc :

$$\bar{d}_{kl} = \sum_{\alpha\beta} (a^{-1})_{k\alpha} d_{\alpha\beta} b_{\beta l}, \quad (\bar{d}^{-1})_{kl} = \sum_{\alpha'\beta'} (b^{-1})_{k\beta'} (d^{-1})_{\beta'\alpha'} (a)_{\alpha'l} \tag{2.11}$$

Supposons que $D_{\Phi\Psi} \neq 0$ et donc $\bar{D}_{\Phi\Psi}$ aussi. Les matrices \mathbf{d} et $\bar{\mathbf{d}}$ sont inversibles et $(d^{-1})_{lk} = \frac{(-)^{k+l} D_{\Phi\Psi}(k|l)}{D_{\Phi\Psi}}$. La matrice densité mixte (2.9) est définie par :

$$\tilde{\rho}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \sum_{kl} \phi_k^*(\mathbf{x}_1) \psi_l(\mathbf{x}_2) (d^{-1})_{lk} \quad (2.12)$$

Elle est invariante sous des transformations unitaires des ϕ_k et/ou des ψ_l . En effet, en utilisant les équations (2.9) et (2.11) on a :

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) &= \sum_{kl} \bar{\phi}_k^*(\mathbf{x}_1) \bar{\psi}_l(\mathbf{x}_2) (\bar{d}^{-1})_{lk} \\ &= \sum_{kl\alpha\alpha'\beta\beta'} \phi_\alpha^*(\mathbf{x}_1) \psi_\beta(\mathbf{x}_2) a_{\alpha k}^* b_{\beta l} a_{\alpha' k} (b^{-1})_{l\beta'} (d^{-1})_{\beta'\alpha'} \end{aligned} \quad (2.13)$$

mais

$$\sum_k a_{\alpha k}^* a_{\alpha' k} = \sum_l a_{\alpha' k} a_{k\alpha}^{-1} = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (\mathbf{a} \text{ est unitaire}) \quad (2.14)$$

$$\sum_l b_{\beta l} b_{l\beta'}^{-1} = \delta_{\beta\beta'} \quad (2.15)$$

donc

$$\tilde{\rho}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \sum_{\alpha\beta} \phi_\alpha^*(\mathbf{x}_1) \psi_\beta(\mathbf{x}_2) (d^{-1})_{\beta\alpha} = \tilde{\rho}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad (2.16)$$

Comme la matrice \mathbf{d} est inversible, on peut définir un ensemble de nouvelles fonctions d'onde $|\psi'_k\rangle$ défini par :

$$|\psi'_k\rangle = \sum_l |\psi_l\rangle (d^{-1})_{lk} \quad (2.17)$$

qui forment une nouvelle base $\{\psi'_k\}$ qui est orthonormale avec $\{\phi_i\}$. En effet,

$$\langle \phi_i | \psi'_k \rangle = \sum_l \langle \phi_i | \psi_l \rangle (d^{-1})_{lk} = \sum_l d_{il} (-)^{k+l} \frac{D_{\Phi\Psi}(k|l)}{D_{\Phi\Psi}} = \delta_{ik} \quad (2.18)$$

On peut alors réécrire la densité mixte (2.12) sous une autre forme :

$$\tilde{\rho}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \sum_k \phi_k^*(\mathbf{x}_1) \psi'_k(\mathbf{x}_2) \quad (2.19)$$

qui est un élément de matrice en représentation position de l'opérateur densité mixte :

$$\hat{\tilde{\rho}} = \sum_k^N |\psi'_k\rangle \langle \phi_k| \quad (2.20)$$

Les propriétés de la densité mixte

Le concept de matrice densité mixte qui conduit à une généralisation du théorème de Wick va être utilisé ici pour restaurer les symétries brisées par le champ moyen. Son opérateur à un corps associé n'est pas hermitique en général. Il vérifie des relations analogues à celles de l'opérateur densité à un corps associé à un déterminant de Slater (1.20), c'est-à-dire :

+ La valeur de sa trace dans le sous-espace des états occupés de $|\Phi\rangle$ est égale à N :

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_i^N \langle \phi_i | \hat{\rho} | \phi_i \rangle = \sum_i^N \langle \phi_i | \psi'_k \rangle \langle \phi_k | \phi_i \rangle = \sum_i^N \delta_{ik} \delta_{ki} = N \quad (2.21)$$

+ Il est idempotent :

$$\hat{\rho}^2 = \left(\sum_k^N |\psi'_k\rangle \langle \phi_k| \right) \left(\sum_l^N |\psi'_l\rangle \langle \phi_l| \right) = \sum_k^N |\psi'_k\rangle \langle \phi_k| = \hat{\rho} \quad (2.22)$$

+ La non hermiticité de $\hat{\rho}$ conduit en général à une fonction densité mixte $\tilde{\rho}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$ complexe.

+ La densité mixte brise évidemment les symétries spatiales brisées par $|\phi\rangle$ et/ou $|\psi\rangle$. Ceci conduit à ce qu'un hamiltonien réduit défini avec cette densité va également briser ces symétries.

2.3 Application du théorème de Löwdin

La formule (2.7) permet de calculer les éléments de matrice d'un opérateur $\hat{\Theta}$ à 1 et 2 corps entre deux déterminants de Slater quelconques. Dans notre cas une généralisation de la méthode du vide relatif définie dans la référence [4] est nécessaire. Elle sera utilisée, comme on le verra, pour calculer les éléments de matrice de cet opérateur $\hat{\Theta}$ entre deux déterminants de Slater $|\mathbf{A}\rangle$, $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle$ où $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle$ est défini à partir d'un déterminant de Slater $|\mathbf{B}\rangle$ par $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle = \hat{\Pi}|\mathbf{B}\rangle$, $\hat{\Pi}$ étant l'opérateur de parité. A cet effet, nous allons introduire le concept de bases bi-orthogonales qui nous sera utile non seulement pour calculer les éléments de matrice mais aussi pour définir, dans le prochain chapitre le "champ moyen mixte".

2.3.1 Bases bi-orthogonales

Considérons deux déterminants de Slater :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= (N!)^{-\frac{1}{2}} \det\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\} \\ \tilde{\mathbf{B}} &= (N!)^{-\frac{1}{2}} \det\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

qui sont construits chacun à partir de deux bases de fonctions d'onde individuelles ortho-normées :

$$\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\} \text{ avec } \langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.24)$$

$$\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\} \text{ avec } \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.25)$$

avec

$$|\psi_i\rangle = \hat{\pi} |\phi_i\rangle \quad (2.26)$$

où $\hat{\pi}$ est l'opérateur de parité dans le sous espace à 1 corps de l'espace de Fock. Les états des deux bases ne sont pas en général orthonormaux entre eux. Le couple de déterminants (2.23) est un cas particulier de (2.2). Nous allons construire un déterminant de Slater normalisé \mathbf{B}' dont les états occupés de $|\psi'_i\rangle$ sont définis par la transformation linéaire :

$$|\psi'_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle (d^{-1})_{ji} \quad (2.27)$$

où la somme porte sur tous les états occupés $|\psi_j\rangle$ de $|\mathbf{B}\rangle$.

Comme on a vu les états $|\psi'_i\rangle$ forment un jeu d'états qui est orthogonal avec celui défini par les états $|\phi_i\rangle$:

$$\langle \phi_i | \psi'_j \rangle = \langle \phi_j | \psi'_i \rangle = \delta_{ij} \quad (2.28)$$

avec en outre

$$\langle \psi'_i | \psi'_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.29)$$

Les bases $\{\psi'_i\}$ et $\{\phi_i\}$ forment un couple de bases bi-orthogonales. On notera que :

$$\langle \psi_i | \psi'_j \rangle \neq \delta_{ij} \quad (2.30)$$

On appellera $\det\{\psi'_i\}$ la quantité $\langle \{\mathbf{r}_\alpha\} | \mathbf{B}' \rangle (N!)^{\frac{1}{2}}$ et on adoptera une définition similaire pour $\det\{\psi_i\}$. Puisque $|\mathbf{B}'\rangle = (\mathbf{d}^{-1})^T |\mathbf{B}\rangle$ (où le suffixe T indique la transposition) on aura

$$\det\{\psi'_i\} = (\det \mathbf{d})^{-1} \det\{\psi_i\} = \frac{\det\{\psi_i\}}{\langle \mathbf{A} | \widetilde{\mathbf{B}} \rangle} \quad (2.31)$$

Il en résulte que

$$|\mathbf{B}'\rangle = \frac{|\widetilde{\mathbf{B}}\rangle}{\langle \mathbf{A} | \widetilde{\mathbf{B}} \rangle} \quad (2.32)$$

et donc

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \widetilde{\mathbf{B}} \rangle = \langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B}' \rangle \langle \mathbf{A} | \widetilde{\mathbf{B}} \rangle \quad (2.33)$$

Cette approche n'est valable que si **si la matrice d est inversible** c'est-à-dire si $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} \neq 0$.

Dans ce qui suit, nous considérons "le cas limite" où toutes les fonctions d'ondes individuelles $|\phi_i\rangle$ ont une parité déterminée π_i (c'est-à-dire quand $q_3 = 0$). Dans ce cas limite on obtient :

$$d_{kl} = \pi_k \delta_{kl} \quad (2.34)$$

et

$$|\psi'_i\rangle = \sum_j^N |\psi_j\rangle (d^{-1})_{ji} = \sum_j^N (\pi_j |\phi_j\rangle) (\pi_j \delta_{ji}) = |\phi_i\rangle \quad (2.35)$$

ce qui nous permet de retrouver pour $\tilde{\rho}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$ la matrice densité usuelle (1.20) :

$$\rho(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \sum_k^N \phi_k^*(\mathbf{x}_1) \phi_k(\mathbf{x}_2) \quad (2.36)$$

et de façon correspondante pour $\hat{\rho}$ l'opérateur de matrice densité usuelle $\hat{\rho}$ (1.21) :

$$\hat{\rho} = \sum_k^N |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (2.37)$$

2.3.2 Généralisation de la méthode du vide relatif

Pour calculer les éléments de matrice $\langle \mathbf{A} | \hat{\Theta} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle$, la méthode du vide relatif définie dans la référence [4] sera généralisée en utilisant les méthodes présentées sur la Figure 2.2 suivant la valeur du recouvrement $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} = \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle$. Dans ce qui suit nous supposons que la déformation octupolaire est toujours différente de zéro (le calcul dans le cas limite est en effet bien connu).

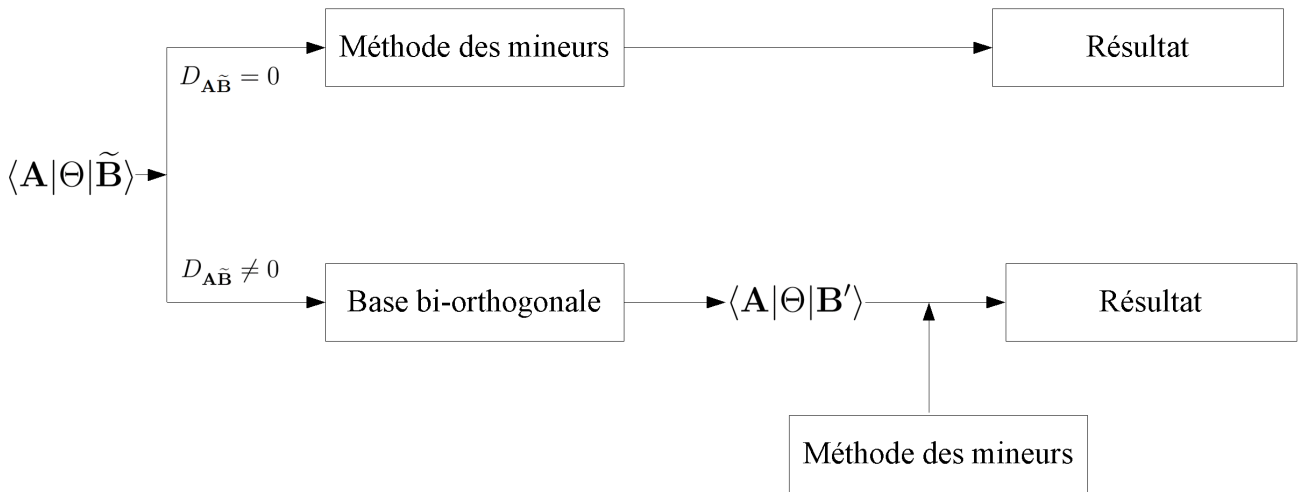


FIGURE 2.2 – Schéma illustrant nos calculs d'éléments de matrice

Recouvrement $\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle$

$$+ \text{ Si } |\mathbf{B}\rangle = |\mathbf{A}\rangle$$

En utilisant la formule (2.7), on obtient :

$$\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{A}}} = \det \mathbf{d} \quad (2.38)$$

Comme la symétrie axiale et l'invariance par renversement du sens du temps sont imposées, la matrice \mathbf{d} est diagonale par blocs (cf. annexe C). On appelle $\mathbf{d}(\Omega_i)$ la sous-matrice représentée par le bloc $\Omega_i (i > 0)$ et D_{Ω_i} son déterminant. Le recouvrement $\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle$ est égal à :

$$D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{A}}} = \left(\prod_i D_{\Omega_i} \right)^2 \quad (2.39)$$

Dans le cas limite on retrouve l'équation (1.119). Il est clair que le recouvrement $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{A}}}$ doit tendre vers 0 quand q_3 augmente. Cependant il garde une valeur finie à grande valeur de q_3 . Nous avons trouvé, par exemple, que pour le noyau ^{222}Ra à moment quadripolaire axial q_2 fixé et pour une valeur très grande de q_3 ($q_3 \sim 2.10^4 \text{fm}^3$), $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{A}}}$ est très petit mais reste différent de zéro. Ceci assure que la matrice \mathbf{d} demeure dans ce cas inversible.

$$+ \text{ Si } |\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle$$

Le recouvrement :

$$\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \langle \mathbf{A} | \hat{\Pi} a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle \quad (2.40)$$

n'est différent de zéro que si $\Omega_{y'} = \Omega_y$. En effet, supposons comme c'est le cas considéré ici que $|\mathbf{A}\rangle$ soit un état propre de l'opérateur \hat{J}_z de valeur propre Ω_0 et que les états y et y' considérés soient également des états propres de \hat{J}_z (de valeurs propres $\Omega_y, \Omega_{y'}$). On en déduit :

$$\forall y'; \hat{J}_z a_{y'}^\dagger |\mathbf{A}\rangle = (\Omega_0 + \Omega_{y'}) a_{y'}^\dagger |\mathbf{A}\rangle \quad (2.41)$$

$$\forall y; \hat{J}_z a_y |\mathbf{A}\rangle = (\Omega_0 - \Omega_y) a_y |\mathbf{A}\rangle \quad (2.42)$$

$$\forall y, y'; \hat{J}_z a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle = (\Omega_0 + \Omega_{y'} - \Omega_y) a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle \quad (2.43)$$

Puisque $[\hat{J}_z, \hat{\Pi}] = 0$ on a :

$$\begin{aligned} \hat{J}_z |\tilde{\mathbf{B}}\rangle &= \hat{\Pi} \hat{J}_z |\mathbf{B}\rangle \\ &= (\Omega_0 + \Omega_{y'} - \Omega_y) |\tilde{\mathbf{B}}\rangle \end{aligned} \quad (2.44)$$

Les états $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle$ sont donc états propres de \hat{J}_z avec les valeurs propres Ω_0 et $\Omega_0 + \Omega_{y'} - \Omega_y$ respectivement. Le recouvrement de ces deux états n'est donc différent de zéro que si :

$$\boxed{\Omega_{y'} = \Omega_y} \quad (2.45)$$

Cette condition (2.45) permet au recouvrement entre deux états \mathbf{A} et $\tilde{\mathbf{B}}$ d'être différent de zéro puisque les sous-matrices de leurs états occupés (cf. Figure 2.3) ont la même taille. Dans le cas contraire (cf. Figure 2.4) ce recouvrement est nul. La condition (2.45) assure que la matrice \mathbf{d} où $d_{ij} = \langle \phi_i | \psi_j \rangle$ ($|\phi_i\rangle \in |\mathbf{A}\rangle, |\psi_j\rangle \in |\tilde{\mathbf{B}}\rangle$) est inversible. Dans le cas limite, grâce à l'orthogonalité des fonctions d'onde individuelles on peut facilement retrouver l'équation (1.120).

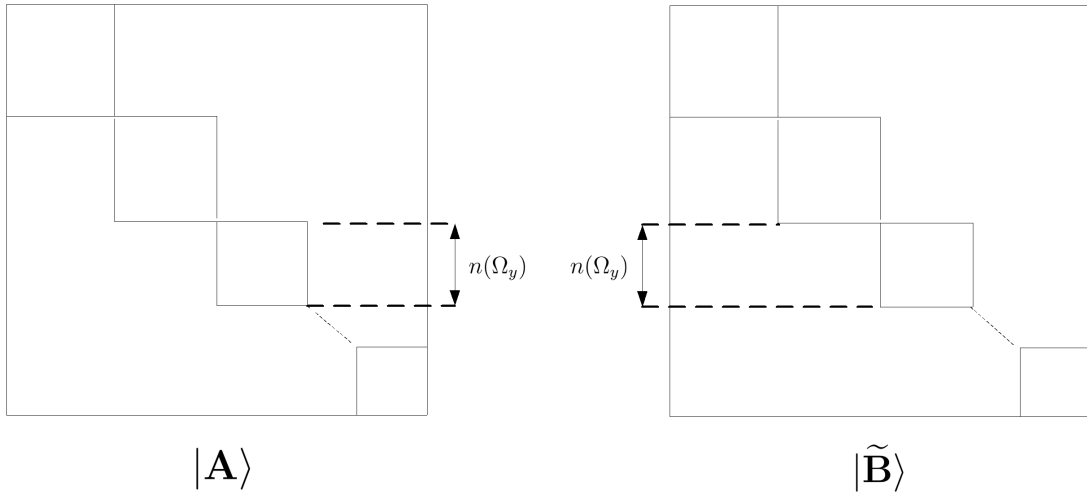


FIGURE 2.3 – Recouvrement $\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle \neq 0$ où $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle$

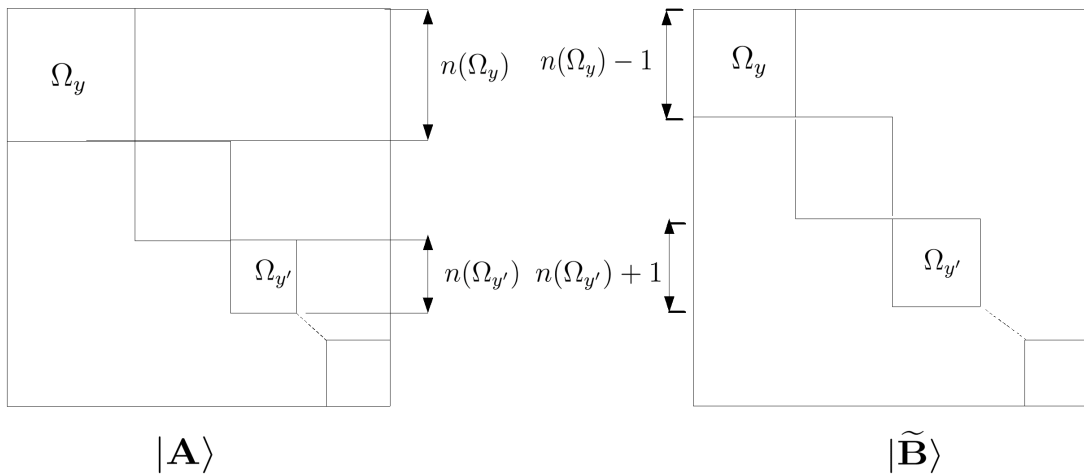


FIGURE 2.4 – Recouvrement $\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = 0$ où $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle$

$$+ |\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_z^\dagger a_y a_z |\mathbf{A}\rangle$$

En utilisant la même méthode que ci-dessus on peut montrer que ce recouvrement ne peut être différent de zéro si (cf. Figure 2.5) :

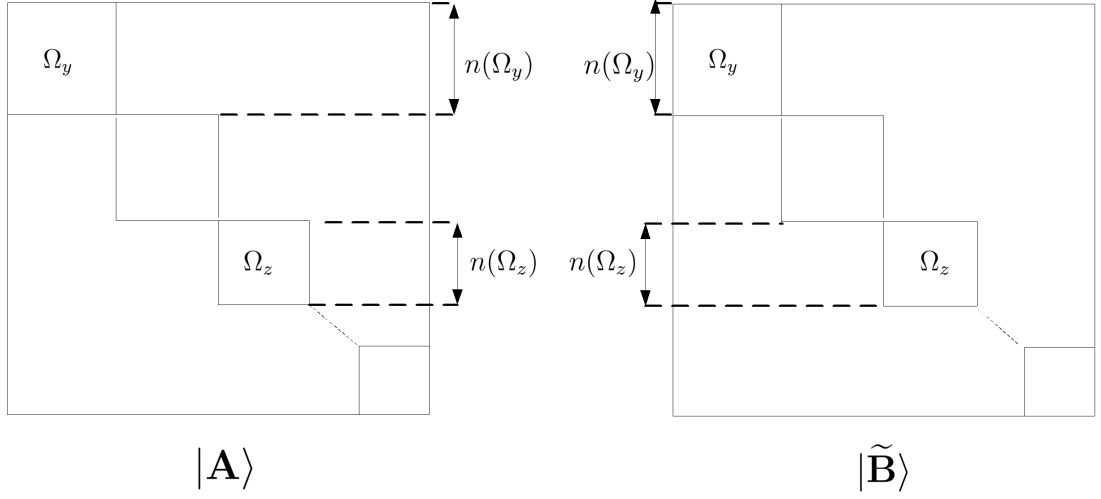


FIGURE 2.5 – Recouvrement $\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle \neq 0$ où $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_z^\dagger a_y a_z |\mathbf{A}\rangle$

$$\begin{cases} \Omega_y = \Omega_{y'} \\ \Omega_z = \Omega_{z'} \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \Omega_y \neq \Omega_{y'} \\ \Omega_z \neq \Omega_{z'} \\ \Omega_y = \Omega_{z'} \\ \Omega_z = \Omega_{y'} \end{cases} \quad (2.46)$$

Opérateur à 1 corps

On définit un opérateur à 1 corps par :

$$\Theta = \sum_i \theta_i \quad (2.47)$$

La matrice \mathbf{d} étant inversible nous avons grâce à l'équation (2.33) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{A}' \rangle \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle \quad (2.48)$$

Les éléments de matrice entre $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\mathbf{A}'\rangle$ sont calculés par la méthode des mineurs (2.7) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{A}' \rangle = \sum_{ij} (-)^{i+j} \langle \phi_i | \theta | \psi'_j \rangle D'(i|j) \quad (2.49)$$

où la somme sur i et j porte sur les états occupés de \mathbf{A} et \mathbf{A}' et où $D'(i|j)$ est le mineur d'ordre 1 de la matrice \mathbf{d}' . Mais puisque

$$d'_{ij} = \langle \phi_i | \psi'_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.50)$$

la matrice \mathbf{d}' n'est rien d'autre que la matrice identité. On a en particulier $D'(i|j) = \delta_{ij}$. En conséquence,

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{A}' \rangle = \sum_i^{t_{\mathbf{A}\mathbf{A}'}} \langle \phi_i | \theta | \psi'_i \rangle \quad (2.51)$$

La notation $\sum_i^{t_{\mathbf{A}\mathbf{A}'}}$ signifie que la sommation porte sur tous les états occupés de $|\mathbf{A}\rangle$ ou de $|\mathbf{A}'\rangle$. Puisque tous les états occupés de $|\mathbf{A}\rangle$ d'indice i ont pour correspondant dans $|\mathbf{A}'\rangle$ les états déduit des premiers par l'opérateur parité on notera dans la suite $t_{\mathbf{A}\mathbf{A}'} \equiv t_{\mathbf{A}}$.

Finalement :

$$\boxed{\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \left[\sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \langle \phi_i | \theta | \psi'_i \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle} \quad (2.52)$$

Dans le cas limite où (pour un noyau pair-pair par renversement du sens du temps ou \hat{T} -pair) :

$$|\tilde{\mathbf{A}}\rangle = |\mathbf{A}\rangle \quad \text{avec} \quad |\psi_j\rangle = \pi_j |\phi_j\rangle, \quad d_{ij} = \pi_j \delta_{ij} \quad (2.53)$$

L'équation (2.27)

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \left[\sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \sum_j^{t_{\mathbf{A}}} \langle \phi_i | \theta | \psi_j \rangle (d^{-1})_{ji} \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle$$

combinée avec l'équation (2.53), conduit au résultat usuel (1.122) :

$$\boxed{\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{A} \rangle = \sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \langle \phi_i | \theta | \phi_i \rangle} \quad (2.54)$$

+ Pour $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle$

Deux cas sont possibles.

Tout d'abord quand $\Omega_y = \Omega_{y'}$: on a vu qu'en général $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} \neq 0$. La matrice \mathbf{d} est inversible ce qui nous permet d'écrire :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B}' \rangle \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle \quad (2.55)$$

Définissant maintenant la matrice \mathbf{d}' et ses différents sous-blocs $\mathbf{d}'(\Omega_i)$ à partir du recouvrement des états individuels de \mathbf{A} et $\tilde{\mathbf{B}}$ on a essentiellement le même résultat que précédemment, c'est-à-dire :

$$\boxed{\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \left[\sum_i^{t_{\mathbf{A}\mathbf{B}'}} \langle \phi_i | \theta | \psi'_i \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle} \quad (2.56)$$

Dans le cas limite, $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} = 0$. L'équation (2.56) n'est plus valide puisque la matrice \mathbf{d} n'est plus inversible. Nous utiliserons donc directement l'équation (2.7) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \sum_{ij} (-)^{i+j} \langle \phi_i | \theta | \psi_j \rangle D(i|j) \quad (2.57)$$

où la somme porte sur tous les états occupés de \mathbf{A} et $\tilde{\mathbf{B}}$ (ou \mathbf{B}).

Ce cas est assez comparable au cas où $\Omega_y \neq \Omega_{y'}$ que nous allons étudier en détail maintenant. La matrice \mathbf{d} n'est pas ici diagonale par blocs. Par exemple dans l'exemple présenté sur la Figure 2.6, supposons que $|\mathbf{A}\rangle$ contienne $n = 10$ états propres de \hat{j}_z (4 pour Ω_α , 3 pour Ω_β , 3 pour Ω_γ). Les $|\psi_i\rangle$ correspondant sont des états propres de \hat{j}_z avec les mêmes valeurs propres. Supposons que $|\mathbf{B}\rangle = a_{11}^\dagger a_2 |\mathbf{A}\rangle$ où $|\phi_2\rangle$ et $|\phi_{11}\rangle$ sont des états propres de \hat{j}_z ayant des valeurs propres respectivement Ω_α et Ω_γ .

		3 états			3 états			4 états			
		Ω_α	Ω_α	Ω_α	Ω_β	Ω_β	Ω_β	Ω_γ	Ω_γ	Ω_γ	Ω_γ
		ψ_1	ψ_3	ψ_4	ψ_5	ψ_6	ψ_7	ψ_8	ψ_9	ψ_{10}	ψ_{11}
4 états	$\Omega_\alpha \phi_1$	$d_{1,1}$	$d_{1,3}$	$d_{1,4}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\Omega_\alpha \phi_2$	$d_{2,1}$	$d_{2,3}$	$d_{2,4}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\Omega_\alpha \phi_3$	$d_{3,1}$	$d_{3,3}$	$d_{3,4}$	0	0	0	0	0	0	0
	$\Omega_\alpha \phi_4$	$d_{4,1}$	$d_{4,3}$	$d_{4,4}$	0	0	0	0	0	0	0
3 états	$\Omega_\beta \phi_5$	0	0	0	$d_{5,5}$	$d_{5,6}$	$d_{5,7}$	0	0	0	0
	$\Omega_\beta \phi_6$	0	0	0	$d_{6,5}$	$d_{6,6}$	$d_{6,7}$	0	0	0	0
	$\Omega_\beta \phi_7$	0	0	0	$d_{7,5}$	$d_{7,6}$	$d_{7,7}$	0	0	0	0
3 états	$\Omega_\gamma \phi_8$	0	0	0	0	0	0	$d_{8,8}$	$d_{8,9}$	$d_{8,10}$	$d_{8,11}$
	$\Omega_\gamma \phi_9$	0	0	0	0	0	0	$d_{9,8}$	$d_{9,9}$	$d_{9,10}$	$d_{9,11}$
	$\Omega_\gamma \phi_{10}$	0	0	0	0	0	0	$d_{10,8}$	$d_{10,9}$	$d_{10,10}$	$d_{10,11}$

FIGURE 2.6 – Matrice \mathbf{d} non – diagonale

On voit facilement qu'il n'y a qu'un seul mineur non nul, soit $D(2|11)$ obtenu en supprimant la ligne ϕ_2 et la colonne ψ_{11} . Il est égal au déterminant d'une matrice diagonale par bloc :

$$D(2|11) = \begin{array}{c|cccccccccc} & \Omega_\alpha & \Omega_\alpha & \Omega_\alpha & \Omega_\beta & \Omega_\beta & \Omega_\beta & \Omega_\gamma & \Omega_\gamma & \Omega_\gamma \\ & \psi_1 & \psi_3 & \psi_4 & \psi_5 & \psi_6 & \psi_7 & \psi_8 & \psi_9 & \psi_{10} \\ \hline \Omega_\alpha \phi_1 & d_{1,1} & d_{1,3} & d_{1,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_\alpha \phi_3 & d_{3,1} & d_{3,3} & d_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_\alpha \phi_4 & d_{4,1} & d_{4,3} & d_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_\beta \phi_5 & 0 & 0 & 0 & d_{5,5} & d_{5,6} & d_{5,7} & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_\beta \phi_6 & 0 & 0 & 0 & d_{6,5} & d_{6,6} & d_{6,7} & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_\beta \phi_7 & 0 & 0 & 0 & d_{7,5} & d_{7,6} & d_{7,7} & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_\gamma \phi_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{8,8} & d_{8,9} & d_{8,10} \\ \Omega_\gamma \phi_9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{9,8} & d_{9,9} & d_{9,10} \\ \Omega_\gamma \phi_{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{10,8} & d_{10,9} & d_{10,10} \end{array} \quad (2.58)$$

En fait ceci n'est la représentation de la matrice \mathbf{d} définie en (2.5) qu'à un facteur $(-)^{y+n}$ près dû au réarrangement des opérateurs de fermions dans le bon ordre. Donc on trouve (prenant en compte le facteur de phase précédent) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \langle \phi_y | \theta | \psi_{y'} \rangle D(y|y') \quad (2.59)$$

Dans le cas limite on trouve le résultat attendu pour un opérateur commutant avec $\hat{\Pi}$ et un noyau pair-pair \hat{T} -pair

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \pi_y \langle \phi_y | \theta | \phi_{y'} \rangle \quad (2.60)$$

En effet $D(y|y')$ correspond à une matrice diagonale $a_{ij} = \delta_{ij} \pi_i$ dont le déterminant est clairement $\prod_{i=1}^{n-1} \pi_i$ c'est-à-dire $\pi_{\mathbf{A}} \pi_y$ (mais $\pi_{\mathbf{A}} = \pi_{\mathbf{B}} = +1$ pour un noyau pair-pair dont la solution est paire par renversement du sens du temps).

Supposons l'opérateur $\hat{\Theta}$ scalaire, ce qui implique en particulier que $[\hat{\Theta}, \hat{J}_z] = 0$. Puisque $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle$ sont états propres de \hat{J}_z ceci implique dans tous les cas où $\Omega_{y'} \neq \Omega_y$ que les éléments de matrice $\langle \mathbf{A} | \hat{\Theta} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle$ sont nuls. Cette remarque pourra être appliquée à d'autres éléments de matrice étudiés dans ce qui suit.

$$+ \text{ Pour } |\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_{z'}^\dagger a_y a_z |\mathbf{A}\rangle$$

Etudions d'abord les cas où $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} \neq 0$ ($\Omega_y = \Omega_{y'}$ et $\Omega_z = \Omega_{z'}$)

La matrice \mathbf{d} étant inversible, on obtient le résultat (2.56) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \left[\sum_i {}^t \mathbf{A} \mathbf{B}' \langle \phi_i | \theta | \psi_i' \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle \quad (2.61)$$

Dans le cas où $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} = 0$ (tel que $\Omega_y = \Omega_{y'}$ et $\Omega_z \neq \Omega_{z'}$), la matrice \mathbf{d} n'est pas inversible et on applique directement l'équation (2.7) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \sum_{ij} (-)^{i+j} \langle \phi_i | \theta | \psi_j \rangle D(i|j) \quad (2.62)$$

où la somme porte sur tous les états occupés de \mathbf{A} et $\tilde{\mathbf{B}}$ (ou \mathbf{B}). On constate qu'il n'y a qu'un mineur $D(i|j)$ différent de zéro obtenu quand on supprime le couple $\{|\phi_z\rangle, |\psi_{z'}\rangle\}$. Il en résulte que

$$\boxed{\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \varphi(-)^{z+z'} \langle \phi_z | \theta | \psi_{z'} \rangle D(z|z')} \quad (2.63)$$

où φ est un facteur de phase correspondant à la signature de la permutation qui fait passer de l'ordre des états à 1 corps dans le déterminant de Slater $|\mathbf{B}\rangle$ défini par $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_z^\dagger a_y a_z |\mathbf{A}\rangle$ à celui retenu dans le calcul effectif de la matrice \mathbf{d} .

Pour ne pas alourdir le texte par une présentation détaillée de l'ordre retenu des états à 1 corps dans nos déterminants de Slater, ici et dans ce qui suit nous ne donnerons pas l'expression explicite de φ . Dans le cas limite le déterminant de la sous-matrice $\mathbf{d}(\Omega_y) = 0$. On retrouve donc le résultat évident (1.126) :

$$\boxed{\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = 0} \quad (2.64)$$

Enfin considérons le cas $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} = 0$ (correspondant à $\Omega_y \neq \Omega_{y'}$ et $\Omega_z \neq \Omega_{z'}$). Dans ce cas, il est clair qu'aucun mineur n'est non nul (même les mineurs $D(z|z')$ ou $D(y|y')$). Donc :

$$\boxed{\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = 0} \quad (2.65)$$

Opérateur à deux corps

On définit un opérateur à deux corps par :

$$\Theta = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \theta_{ij} \quad (2.66)$$

+ Pour $\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{A}} \rangle$

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{A}' \rangle \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle \quad (2.67)$$

La matrice \mathbf{d} est inversible donc on peut utiliser l'équation (2.7) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{A}' \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^{\mathbf{A}\mathbf{A}'} (-)^{i+j+k+l} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \psi'_k \psi'_l \rangle D'(ij|kl) \quad (2.68)$$

où la somme sur i et j porte sur les états occupés de \mathbf{A} et celle sur k et l sur les états occupés de \mathbf{A}' avec $D'(ij|kl)$ mineur d'ordre 2 de la matrice \mathbf{d}' qui n'est autre que la matrice identité :

$$d'_{ij} = \langle \phi_i | \psi'_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.69)$$

Puisque $D'_{\mathbf{A}\mathbf{A}'} = \langle \mathbf{A} | \mathbf{A}' \rangle = 1$ (donc non nul), nous pouvons utiliser l'équation (51) de la référence [49] pour exprimer un mineur d'ordre 2 de cette matrice sous forme d'un déterminant de mineurs d'ordre 1 :

$$(-)^{i+j+k+l} D'(ij|kl) = D'^{-1}_{\mathbf{A}\mathbf{A}'} \begin{vmatrix} D'_{\mathbf{A}\mathbf{A}'}(i|k) & D'_{\mathbf{A}\mathbf{A}'}(i|l) \\ D'_{\mathbf{A}\mathbf{A}'}(j|k) & D'_{\mathbf{A}\mathbf{A}'}(j|l) \end{vmatrix} \quad (2.70)$$

d'où

$$D'(ij|kl) = \begin{vmatrix} (d'^{-1})_{ki} & (d'^{-1})_{li} \\ (d'^{-1})_{kj} & (d'^{-1})_{lj} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \delta_{ik} & \delta_{il} \\ \delta_{jk} & \delta_{jl} \end{vmatrix} \quad (2.71)$$

donc

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{A}' \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^{\mathbf{A}\mathbf{A}'} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \psi'_k \psi'_l \rangle (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij}^{t_{\mathbf{A}}} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \widetilde{\psi'_i \psi'_j} \rangle \end{aligned} \quad (2.72)$$

où $\langle \alpha \beta | \theta | \widetilde{\gamma \delta} \rangle = \langle \alpha \beta | \theta | \gamma \delta \rangle - \langle \alpha \beta | \theta | \delta \gamma \rangle$ (élément de matrice antisymétrisé) et où $\sum^{t_{\mathbf{A}}}$ a la même signification que pour l'équation (2.52). Finalement :

$$\boxed{\langle \mathbf{A} | \Theta | \widetilde{\mathbf{A}} \rangle = \left[\frac{1}{2} \sum_{ij}^{t_{\mathbf{A}}} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \widetilde{\psi'_i \psi'_j} \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \widetilde{\mathbf{A}} \rangle} \quad (2.73)$$

Il est clair que dans le cas limite on retrouve le résultat usuel (1.128).

+ Pour $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y |\mathbf{A}\rangle$

Etudions tout d'abord le cas où $D_{\mathbf{A}\widetilde{\mathbf{B}}} \neq 0$ ($\Omega_y = \Omega_{y'}$). La matrice \mathbf{d} est inversible, utilisant l'équation (2.7), on a

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B}' \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^{\mathbf{A}\mathbf{B}'} (-)^{i+j+k+l} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \psi'_k \psi'_l \rangle D'(ij|kl) \quad (2.74)$$

Il est clair que le fait d'enlever l'état occupé y et d'ajouter l'état y' ne change pas la taille des blocs. On peut donc utiliser (2.70) ce qui conduit à

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \left[\frac{1}{2} \sum_{ij}^{t_{\mathbf{AB}'}} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \widetilde{\psi'_i \psi'_j} \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle \quad (2.75)$$

Considérons ensuite le cas où $D_{\mathbf{AB}} = 0$ ($\Omega_y \neq \Omega_{y'}$). La matrice est singulière. On applique directement l'équation (2.7)

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} (-)^{i+j+k+l} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \psi_k \psi_l \rangle D(ij|kl) \quad (2.76)$$

Dans ce cas, seulement quatre types de mineurs sont différents de zéros et égaux entre eux. Ceci permet de réécrire l'équation (2.76) comme :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{ik} (-)^{i+y+k+y'} \langle \phi_i \phi_y | \theta | \psi_k \psi_{y'} \rangle D(iy|ky') - \frac{1}{2} \sum_{il} (-)^{i+y+y'+l} \langle \phi_i \phi_y | \theta | \psi_{y'} \psi_l \rangle D(iy|y'l) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{jk} (-)^{y+j+k+y'} \langle \phi_y \phi_j | \theta | \psi_k \psi_{y'} \rangle D(yj|ky') + \frac{1}{2} \sum_{jl} (-)^{y+j+y'+l} \langle \phi_y \phi_j | \theta | \psi_{y'} \psi_l \rangle D(yj|y'l) \end{aligned}$$

Utilisant la propriété générale de tout élément de matrice à 2 corps $\theta_{iyky'} = \theta_{yiy'k}$ nous obtenons donc :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \varphi \sum_{ik}^{t_{\mathbf{A}}} (-)^{i+y+k+y'} \langle \phi_i \phi_y | \theta | \widetilde{\psi_k \psi_{y'}} \rangle D(iy|ky') \quad (2.77)$$

où φ est un facteur de phase introduit précédemment. Dans le cas limite, puisque :

$$D(iy|ky') = \pi_k \pi_{y'} \delta_{ik} \quad (2.78)$$

nous retrouvons le même résultat que (1.129) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B} \rangle = \sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \pi_i \pi_{y'} \langle \phi_i \phi_y | \theta | \widetilde{\phi_i \phi_{y'}} \rangle \quad (2.79)$$

+ Pour $|\mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_{z'}^\dagger a_y a_z |\mathbf{A}\rangle$

Considérons d'abord les cas où $D_{\mathbf{AB}} \neq 0$ ($\Omega_y = \Omega_{y'}$ et $\Omega_z = \Omega_{z'}$). Sous cette condition la matrice \mathbf{d} est inversible donc :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B}' \rangle \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle \quad (2.80)$$

A l'aide de l'équation (2.7) il est évident que le fait d'enlever les états occupés y, z et d'ajouter les états y', z' ne change pas la taille des blocs. La validité de la relation (2.71) conduit à

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \left[\frac{1}{2} \sum_{ij}^{t_{\mathbf{A}\mathbf{B}'}} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \widetilde{\psi'_i \psi'_j} \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle \quad (2.81)$$

Considérons ensuite le cas où $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} = 0$ ($\Omega_y \neq \Omega_{y'}$ et $\Omega_z = \Omega_{z'}$). La matrice \mathbf{d} étant singulière nous utilisons la formule (2.7) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} (-)^{i+j+k+l} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \psi_k \psi_l \rangle D(ij|kl) \quad (2.82)$$

Ce cas ressemble au cas précédent (équation (2.77)) car le fait d'enlever l'état z et d'ajouter l'état z' ne change pas la taille du bloc correspondant. Donc nous obtenons facilement :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \varphi \sum_{ik}^{t_{\mathbf{A}}} (-)^{i+y+k+y'} \langle \phi_i \phi_y | \theta | \widetilde{\psi_k \psi_{y'}} \rangle D(iy|ky') \quad (2.83)$$

Dans le cas limite le mineur $D(iy|ky')$ n'est différent de zéro que si $i = z$ et $k = z'$. On retrouve donc le résultat usuel :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \mathbf{B} \rangle = \pi_{z'} \pi_{y'} \langle \phi_z \phi_y | \theta | \widetilde{\phi_{z'} \phi_{y'}} \rangle \quad (2.84)$$

Considérons maintenant le cas où $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} = 0$ ($\Omega_y \neq \Omega_{y'}$ et $\Omega_z \neq \Omega_{z'}$). La matrice \mathbf{d} n'étant pas inversible, on utilise l'équation (2.7) :

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ijkl}^{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} (-)^{i+j+k+l} \langle \phi_i \phi_j | \theta | \psi_k \psi_l \rangle D(ij|kl) \quad (2.85)$$

Seulement quatre types de mineur sont différents de zéro et égaux entre eux

$$D(yz|y'z') = D(yz|z'y') = D(zy|y'z') = D(zy|z'y') \quad (2.86)$$

donc

$$\langle \mathbf{A} | \Theta | \tilde{\mathbf{B}} \rangle = \left[\varphi (-)^{y+z+y'+z'} \langle \phi_y \phi_z | \theta | \widetilde{\psi_{z'} \psi_{y'}} \rangle \right] D(yz|z'y') \quad (2.87)$$

Dans le cas limite, on retrouve le même résultat que celui l'équation (1.130).

Quelques premières applications

Soit $\hat{\rho}^{00}$ l'opérateur matrice densité mixte à 1 corps défini par :

$$\hat{\rho}^{00} = \sum_i |\psi'_i\rangle \langle \phi_i| \quad (|\phi_i\rangle \in |\Phi_0\rangle \text{ et } |\psi'_i\rangle \in |\Phi'_0\rangle) \quad (2.88)$$

Nous allons calculer les éléments de matrice $\langle \Phi_0 | \hat{\rho}^{00} | \tilde{\Phi}_0 \rangle$ et $\langle \tilde{\Phi}_0 | \hat{\rho}^{00} | \Phi_0 \rangle$. En utilisant la formule (2.52) on obtient :

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_0 | \hat{\rho}^{00} | \tilde{\Phi}_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | \hat{\rho}^{00} | \Phi'_0 \rangle \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \sum_i^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i | \psi'_i \rangle \langle \phi_i | \psi'_i \rangle \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \\
 &= \sum_i^{t_{\Phi_0}} \delta_{ii} \delta_{ii} \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle = N \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{2.89}$$

et

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{\Phi}_0 | \hat{\rho}^{00} | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi'_0 | \hat{\rho}^{00} | \Phi_0 \rangle \langle \tilde{\Phi}_0 | \Phi_0 \rangle = \sum_i^{t_{\Phi_0}} \langle \psi'_i | \psi'_i \rangle \langle \phi_i | \phi_i \rangle \langle \tilde{\Phi}_0 | \Phi_0 \rangle \\
 &= \sum_i^{t_{\Phi_0}} \delta_{ii} \delta_{ii} \langle \tilde{\Phi}_0 | \Phi_0 \rangle = N \langle \tilde{\Phi}_0 | \Phi_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{2.90}$$

On en déduit donc :

$$\frac{\langle \Phi_0 | \hat{\rho}^{00} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} = \frac{\langle \tilde{\Phi}_0 | \hat{\rho}^{00} | \Phi_0 \rangle}{\langle \tilde{\Phi}_0 | \Phi_0 \rangle} = N \tag{2.91}$$

Ce résultat constitue une généralisation de ce que fournirait le théorème usuel de Wick.

2.4 Matrice densité mixte en coordonnées spatiales

Il faut rappeler que la base à N corps ne contient que l'état $|\Phi_0\rangle$ et les états de transfert de paires. Tous ces états sont pairs par renversement du sens du temps. Dans le cas où la symétrie axiale est imposée, la définition de la matrice densité mixte entre ces configurations (2.12) est valable si la matrice \mathbf{d} est inversible c'est-à-dire si $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} \neq 0$. Pour avoir $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} \neq 0$ la condition (2.46) doit être satisfaite. Considérons des états $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle$ qui possèdent la symétrie axiale par rapport à l'axe Oz , qui sont invariants par renversement du sens du temps et qui satisfont à la condition (2.46). Nous choisirons alors des bases $\{\phi_k\}$ et $\{\psi_k\}$ composées d'états propres de la troisième composante du moment angulaire et de la troisième composante de l'isospin. Des valeurs propres Ω_k positives définiront des états qu'on appellera "positifs" et des valeurs Ω_k négatives correspondront à des états qui sont les renversés du temps des précédents à une phase près. On notera par $\sum_{k>0}$ une somme sur les indices appartenant au sous ensemble positif par opposition à \sum_k qui indique une somme sur tous les états de la base. Nous omettrons l'indice de l'isospin τ puisque les densités ont un isospin bien déterminé (soit neutron soit proton). La densité mixte (2.12) s'écrit alors dans la représentation de position \mathbf{r} et de spin σ :

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') = \sum_{\substack{k \in |\mathbf{A}\rangle \\ l \in |\tilde{\mathbf{B}}\rangle}} \phi_k^*(\mathbf{r}'\sigma') \psi_l(\mathbf{r}\sigma) (\tilde{d}^{-1})_{kl} \tag{2.92}$$

et la densité diagonale en position et scalaire en spin est définie par :

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}(\mathbf{r}) &= \sum_{\sigma} \tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}\sigma) \\
&= \sum_{\sigma} \sum_{\substack{k \in \mathbf{A} \\ l \in \mathbf{B}}} \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_l(\mathbf{r}, \sigma) (\tilde{d}^{-1})_{kl}
\end{aligned} \tag{2.93}$$

Grâce au fait que $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\mathbf{B}\rangle$ sont invariants par renversement du sens du temps (cf. annexe C) on peut définir la matrice \mathbf{d} de dimension N (où N est le nombre des états dans \mathbf{A} ou \mathbf{B}) à partir d'une matrice E de dimension $N/2 \times N/2$

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E^* \end{pmatrix} \tag{2.94}$$

où E^* est la matrice conjuguée de E , donc

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = 2 \sum_{\sigma} \sum_{\substack{k \in \mathbf{A} \\ \Omega_k > 0}} \sum_{\substack{l \in \mathbf{B} \\ \Omega_l = \Omega_k}} \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_l(\mathbf{r}, \sigma) (\tilde{E}^{-1})_{kl} \tag{2.95}$$

Décomposons les fonctions d'ondes individuelles sur la base d'oscillateur harmonique à symétrie axiale qu'on notera dorénavant B.O.H.S.A. (cf. annexe A) en utilisant les formules (A.15) et (A.17) on obtient (la décomposition de ces états est à coefficients réels) :

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}(\mathbf{r}) &= \frac{2}{\pi} \beta_{\perp}^2 \beta_z \sum_{\Sigma = \pm \frac{1}{2}} \sum_{n_z n_r \Lambda} \sum_{n'_z n'_r \Lambda'} \sum_{\substack{k \in \mathbf{A} \\ \Omega_k > 0}} \sum_{\substack{l \in \mathbf{B} \\ \Omega_l = \Omega_k}} (\tilde{E}^{-1})_{kl} C_{\alpha}^{(k)} C_{\alpha'}^{(l)} e^{-(\xi^2 + \eta)} \eta^{\Lambda} N_{n_z} N_{n'_z} N_{n_r}^{\Lambda} N_{n'_r}^{\Lambda'} \\
&\quad \times H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) L_{n_r}^{\Lambda}(\eta) L_{n'_r}^{\Lambda'}(\eta) \delta_{\Lambda \Lambda'} (-)^{n'_z + \Lambda'}
\end{aligned} \tag{2.96}$$

avec η et ξ sont les variables sans dimensions appelées les coordonnées étirées

$$\eta = z\beta_z, \quad \xi = r^2\beta_{\perp}^2 \tag{2.97}$$

où β_z et β_{\perp} sont les constantes d'ocillateur liés aux fréquences d'ocillateur ω_z et ω_{\perp} (cf. annexe A) via les relations :

$$\beta_z = \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}}, \quad \beta_{\perp} = \sqrt{\frac{m\omega_{\perp}}{\hbar}} \tag{2.98}$$

Nous définissons :

$$\tilde{\rho}_{\alpha\alpha'} \equiv 2 \sum_{\substack{k \in \mathbf{A} \\ \Omega_k > 0}} \sum_{\substack{l \in \mathbf{B} \\ \Omega_l = \Omega_k}} C_{\alpha}^{(k)} C_{\alpha'}^{(l)} (\tilde{E}^{-1})_{kl} \tag{2.99}$$

avec

$$|\alpha\rangle = |n_z, n_r, \Lambda, \Sigma\rangle \quad \text{et} \quad |\alpha'\rangle = |n'_z, n'_r, \Lambda, \Sigma\rangle \quad (2.100)$$

Finalement, on a :

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = c \sum_{n_z n_r \Lambda \Sigma} \sum_{n'_z n'_r \Lambda \Sigma} \tilde{\rho}_{\alpha\alpha'} \eta^\Lambda N_{n_z} N_{n'_z} N_{n_r}^\Lambda N_{n'_r}^\Lambda H_{n_z}(\xi) H_{n'_z}(\xi) L_{n_r}^\Lambda(\eta) L_{n'_r}^\Lambda(\eta) (-)^{n'_z + \Lambda} \quad (2.101)$$

où $c = \frac{1}{\pi} \beta_z \beta_\perp^2 e^{-(\xi^2 + \eta)}$. Dans le cas limite, cf. l'annexe C on a :

$$\tilde{\rho}_{\alpha\alpha'} \stackrel{q_3 \rightarrow 0}{=} 2 \sum_{\substack{k \in \mathbf{A} \\ \Omega_k > 0}} \sum_{\substack{l \in \tilde{\mathbf{A}} \\ \Omega_l = \Omega_k}} C_\alpha^{(k)} \pi_l C_{\alpha'}^{(l)} (\pi_k \delta_{kl}) = 2 \sum_{\substack{k \in \mathbf{A} \\ \Omega_k > 0}} C_\alpha^{(k)} C_{\alpha'}^{(k)}$$

Ceci conduit à la densité normale définie dans la référence [8].

Restauration de la symétrie de parité

3.1 Introduction

La symétrie brisée dans le champ moyen peut être restaurée par deux méthodes de projection. L'une appelée méthode de variation après projection (VAP) est un processus variationnel auto-cohérent avec un ensemble de fonctions d'essai possédant la bonne symétrie. Le seconde utilise l'état intrinsèque obtenu par minimisation de l'énergie intrinsèque avec une contrainte de déformation (calculée dans une approche de champ moyen) pour des états qui n'ont pas la bonne symétrie. Cette méthode est appelée projection après variation (PAV). Elle n'est pas auto-cohérente mais est plus facile à mettre en œuvre que la précédente (VAP). C'est cette méthode (PAV) que nous utiliserons à la suite d'un calcul HTDA.

Donc nous projetons la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ obtenue par la méthode HTDA sur des états de bonne parité :

$$|\Psi_p\rangle = N\hat{P}_p|\Psi\rangle, \quad p = \pm 1 \quad (3.1)$$

avec :

$$\hat{P}_p = \frac{1}{2}(1 + p\hat{\Pi}) \quad (3.2)$$

et où la constante N est déterminée par la condition $\langle\Psi_p|\Psi_p\rangle = 1$ soit

$$N = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle + p\langle\Psi|\hat{\Pi}|\Psi\rangle}} \quad (3.3)$$

L'opérateur $\hat{\Pi}$ est l'opérateur de parité qui est une involution, c'est-à-dire qu'il est unitaire et hermitique. Il en résulte que \hat{P} est un projecteur :

$$\hat{P}_p^\dagger = \hat{P}_p, \quad \hat{P}_p^2 = \hat{P}_p \quad (3.4)$$

L'énergie projetée est calculée par :

$$E_p = \langle\Psi_p|\hat{H}|\Psi_p\rangle \quad (3.5)$$

Ceci nous conduit à devoir calculer les éléments de matrice de type $\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle$ et $\langle\Psi|\hat{H}|\tilde{\Psi}\rangle$ où $|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{\Pi}|\Psi\rangle$ ainsi que $\langle\Psi|\Psi\rangle$ et $\langle\Psi|\tilde{\Psi}\rangle$ pour N .

Le Hamiltonien décomposé de la façon décrite dans l'équation (1.106) n'est pas utilisable. En effet, le champ \hat{U}_{HF} y est la réduction à 1 corps de \hat{V} pour $|\Phi_0\rangle$ alors que dans notre cas l'équivalent des contractions implique un bra différent du ket. Nous allons donc effectuer une autre décomposition du Hamiltonien.

Soit \hat{V} une interaction effective de Skyrme, le Hamiltonien (1.6) peut être décomposé de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \left(\hat{K} + \hat{U}_{\text{m}} - \frac{\langle \Phi_0 | \hat{V} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} + E_{\text{R}} \right) + \left(\hat{V} - \hat{U}_{\text{m}} + \frac{\langle \Phi_0 | \hat{V} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} - E_{\text{R}} \right) \\ &= \hat{H}_{\text{MF}} + \hat{V}_{\text{res}}\end{aligned}\quad (3.6)$$

où le potentiel mixte à un corps \hat{U}_{m} est la réduction à un corps de \hat{V} pour $\hat{\rho}^{00}$ définie par l'équation (2.88). Le terme E_{R} est un terme de réarrangement lié à la partie dépendant de la densité de \hat{V} . Donc les éléments de matrice pour des états à un corps quelconques $|\phi_i\rangle$ et $|\psi'_j\rangle$ des bases bi-orthogonales sont :

$$\langle \phi_i | \hat{u}_{\text{m}} | \psi'_j \rangle = \sum_{k,l}^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_k | \hat{\rho}^{00} | \psi'_l \rangle \langle \phi_i \phi_l | \hat{V} | \widetilde{\psi'_j \psi'_k} \rangle \quad (3.7)$$

où la somme sur k et l porte sur les états occupés de $|\Phi_0\rangle$. La matrice $\hat{\rho}^{00}$ est diagonale dans cette base

$$\langle \phi_k | \hat{\rho}^{00} | \psi'_l \rangle = \sum_i \langle \phi_k | \psi'_i \rangle \langle \phi_i | \psi'_l \rangle = \delta_{kl} \quad (3.8)$$

Ceci conduit à

$$\langle \phi_i | \hat{u}_{\text{m}} | \psi'_j \rangle = \sum_{k,l}^{t_{\Phi_0}} \delta_{kl} \langle \phi_i \phi_l | \hat{V} | \widetilde{\psi'_j \psi'_k} \rangle = \sum_k^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{V} | \widetilde{\psi'_j \psi'_k} \rangle \quad (3.9)$$

expression qui est très similaire avec celle obtenue pour le potentiel à 1 corps \hat{U}_{HF} défini par l'équation (1.29).

Le terme $\frac{\langle \Phi_0 | \hat{V} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} - E_{\text{R}}$ est ajouté pour assurer que :

$$\langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{H}_{\text{MF}} | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.10)$$

donc

$$\frac{\langle \Phi_0 | \hat{V}_{\text{res}} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} = 0 \quad (3.11)$$

Dans le cas limite, on a

$$\hat{\rho}^{00} = \hat{\rho} \quad \text{et} \quad \hat{U}_m = \hat{U}_{\text{HF}} \quad (3.12)$$

ce qui conduit à retrouver le Hamiltonien (1.95) à partir du Hamiltonien (3.6).

Dans le calcul pratique nous avons remplacé l'interaction effective \hat{V} par une interaction $\hat{\delta}$ dans l'expression de \hat{V}_{res} des équations (3.6) et (3.9), c'est-à-dire que l'interaction résiduelle est approchée par :

$$\hat{V}_{\text{res}} \approx \hat{\delta} - \hat{\delta}_m + \frac{\langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} \quad (3.13)$$

où $E_R(\hat{\delta}) = 0$.

Le Hamiltonien \hat{H} devient donc

$$\hat{H} \approx \left(\hat{K} + \hat{U}_m - \frac{\langle \Phi_0 | \hat{V} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} + E_R \right) + \left(\hat{\delta} - \hat{\delta}_m + \frac{\langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle} \right) \quad (3.14)$$

La force effective de Skyrme \hat{V} dépend phénoménologiquement de la densité $\rho(\mathbf{r})$ au travers du terme en t_3 de la formule (1.39). Cette densité obtenue par un calcul de type champ moyen Hartree-Fock brise dans le cas étudié la symétrie de réflexion droite-gauche. Il en résulte que \hat{U}_m n'est pas symétrique par rapport à la parité intrinsèque. De plus, $\hat{\rho}^{00}$ ne commute pas avec l'opérateur de parité. Ceci conduit au fait que le potentiel $\hat{\delta}_m$ brise aussi cette symétrie même si $[\hat{\delta}, \hat{\Pi}] = 0$. Donc :

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}] \neq 0 \quad (3.15)$$

Il est donc un peu contradictoire de vouloir restaurer la parité pour les solutions d'un hamiltonien qui brise la parité ! Par ailleurs sur un plan plus pratique, l'énergie de projection s'écrit

$$\begin{aligned} E_p &= \langle \Psi_p | \hat{H} | \Psi_p \rangle \\ &= \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle + p \langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle + p \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \Psi \rangle + \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle}{2(1 + p \langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle)} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Et donc à cause de l'asymétrie par parité de \hat{H} , nous devrions calculer quatre termes au numérateur de l'équation (3.16). A cela on peut ajouter que le terme d'échange de Coulomb dans le champ \hat{U}_m dépend de la densité $\hat{\rho}^{00}$ avec une puissance non entière (1/3). Or $\hat{\rho}^{00}(\mathbf{r})$ peut prendre des valeurs négatives. Donc cette partie de \hat{U}_m ne sera pas définie dans ce cas. Ces deux difficultés sont propres à tous les calculs qui utilisent la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) déduite par exemple de l'interaction de Skyrme. Ceci va nous conduire à restaurer la

symétrie de parité dans un modèle simplifié, qui met en œuvre un hamiltonien conservant la parité.

3.2 Modèle simplifié

Dans ce modèle nous allons porter notre effort de simplification sur deux points : la fonction d'onde $|\Psi\rangle$ et le Hamiltonien (3.14). La fonction d'onde obtenue par notre calcul HTDA non auto-cohérent ne contient que le fondamental $|\Phi_0\rangle$ et les transferts d'une paire de (k, \bar{k}) à (k', \bar{k}') . Ces derniers états $|\Phi_2\rangle$ appartiennent à deux types d'états présentés sur la Figure 3.1 suivant que les valeurs $|\Omega_k|$ et $|\Omega_{k'}|$ sont identiques ou non.

$$|\Phi_2\rangle = a_{k'}^\dagger a_{\bar{k}'}^\dagger a_k a_{\bar{k}} |\Phi_0\rangle \quad (3.17)$$

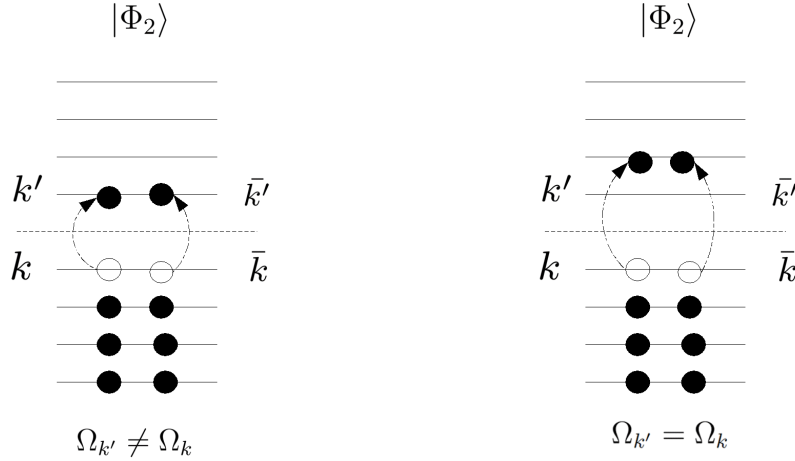


FIGURE 3.1 – Deux types de diffusion d'une paire $|\Phi_2\rangle$

la fonction d'onde totale du système est donc réécrite comme :

$$|\Psi\rangle = \chi_0 |\Phi_0\rangle + \sum_k^{N-1} \chi_2^{(k)} |\Phi_2^{(k)}\rangle \quad (3.18)$$

Soit une interaction nucléon-nucléon effective phénoménologique de Skyrme \hat{V} et un champ moyen \hat{U} quelconque, le hamiltonien total du système \hat{H} peut se décomposer d'une part en un champ moyen $\hat{H}_{\text{MF}} = \hat{K} + \hat{U}$ et d'autre part en une interaction résiduelle $\hat{V}_{\text{res}} = \hat{V} - \hat{U}$.

$$\hat{H} = (\hat{K} + \hat{U}) + (\hat{V} - \hat{U}) = \hat{H}_{\text{MF}} + \hat{V}_{\text{res}} \quad (3.19)$$

Il est évident que nous pouvons ajouter et supprimer de façon « arbitraire » le potentiel \hat{U} qui est par exemple une réduction à un corps de \hat{V} pour une matrice densité à définir.

Comme la plupart des forces effectives de Skyrme utilisées dans des calculs Hartree-Fock ne sont pas capables de reproduire les bonnes propriétés dans les canaux particule-particule trou-trou ainsi qu'il a été déjà remarqué, nous utiliserons une force $\hat{\delta}$ pour définir approximativement l'interaction résiduelle :

$$\hat{V}_{\text{res}} \approx \hat{\delta} - \hat{\delta}_{\text{red}} \quad (3.20)$$

où $\hat{\delta}_{\text{red}}$ est la réduction à un corps de $\hat{\delta}$ pour (en principe) la même matrice densité à définir que précédemment.

Nous voulons insister ici sur l'utilisation que nous décidons d'effectuer ici de l'arbitraire de la décomposition précédente. Quand nous calculerons des éléments de matrice diagonaux (entre deux déterminants de Slater identiques) nous utiliserons dans ce qui précède la matrice densité "intrinsèque" c'est-à-dire de la solution $|\Phi_0\rangle$ considérée. Quand nous aurons à calculer des éléments de matrice non diagonaux, en principe, nous utiliserons pour définir \hat{H}_{MF} et \hat{V}_{res} la matrice densité réduite mixte correspondant aux deux déterminants de Slater considérés telle que elle est discutée dans la sous-section 2.2.2.

Tout d'abord pour définir \hat{H}_{MF} nous avons considéré le Hamiltonien à 1 corps \hat{H}_1 obtenu à partir d'une solution d'un calcul Skyrme-Hartree-Fock plus BCS auto-cohérent convergé. On note cette solution $|\Phi_0(q_2, q_3)\rangle$ qui correspond aux valeurs q_2 et q_3 des moments quadrupolaires et octupolaires axiaux. Ce potentiel contient : un terme cinétique avec masse effective, un terme central, un terme de spin-orbite et le terme de Coulomb (direct exact et échange à l'approximation de Slater). Ce choix correspond à une approximation par rapport à la décomposition décrite précédemment de \hat{H} en un terme à 1 corps \hat{H}_{MF} et une interaction résiduelle \hat{V}_{res} dans le cas d'éléments de matrice non diagonaux du Hamiltonien. En effet il consiste à remplacer dans le seul terme \hat{H}_1 la densité mixte par la densité intrinsèque. Le Hamiltonien (3.14) est réécrit alors :

$$\hat{H}_{\text{appr}} = \hat{H}_1 + \hat{\delta} - \hat{\delta}_{\text{red}} + C\hat{1} \quad (3.21)$$

où la constante C est définie pour la solution $|\Phi_0(q_2, q_3 = 0)\rangle$ par :

$$C = -\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \Phi_0 \rangle \quad (3.22)$$

Elle est ajoutée pour assurer qu'à la limite ($q_3 = 0$) nous ayons :

$$\langle \Phi_0(q_2, q_3 = 0) | \hat{H}_{\text{appr}} | \Phi_0(q_2, q_3 = 0) \rangle = \langle \Phi_0(q_2, q_3 = 0) | \hat{H} | \Phi_0(q_2, q_3 = 0) \rangle \quad (3.23)$$

Nous allons préciser la forme que prend \hat{H}_1 et $\hat{\delta}_{\text{red}}$ dans ce modèle simplifié. Dans ce qui suit nous appelons \hat{H} le Hamiltonien simplifié donné en (3.21).

Terme $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$

Pour évaluer ce terme il faut calculer des éléments de matrice du type $\langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle$ où les $|\Phi_i\rangle$, $|\Phi_j\rangle$ sont soit l'état $|\Phi_0\rangle$ ou l'un des états $|\Phi_2\rangle$. Dans le Hamiltonien (3.21), \hat{H}_1 est le Hamiltonien de Skyrme-Hartree-Fock pour la solution Hartree-Fock $|\Phi_0(q_2, q_3)\rangle$ la plus basse en énergie aux déformations (q_2, q_3) . Le terme $\hat{\delta}_1$ est la réduction à un corps de l'opérateur à deux corps pour cette solution. Notons qu'aux déformations $(q_2, q_3 \neq 0)$ l'opérateur \hat{H}_1 et $\hat{\delta}_1$ ne commutent pas avec la parité :

$$[\hat{H}_1, \hat{\Pi}] \neq 0 \quad \text{et} \quad [\hat{\delta}_1, \hat{\Pi}] \neq 0 \quad (3.24)$$

Terme $\langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle$

Pour évaluer ce terme il faut calculer des éléments de matrice du type $\langle \tilde{\Phi}_i | \hat{H} | \tilde{\Phi}_j \rangle$. Grâce à la liberté que nous avons d'ajouter et de supprimer le champ \hat{U} nous pouvons réécrire le Hamiltonien (3.21) de la manière suivante :

$$\hat{\hat{H}} = \hat{K} + \hat{\hat{U}} + \hat{\delta} - \hat{\tilde{U}} + C\hat{1} \quad (3.25)$$

avec

$$\hat{\hat{U}} = \hat{\Pi} \hat{U} \hat{\Pi} \quad (3.26)$$

où \hat{U} est le potentiel à un corps précédent de telle sorte que (puisque \hat{K} et $\hat{\delta}$ commutent avec $\hat{\Pi}$) :

$$\hat{\hat{H}} = \hat{\Pi} \hat{H} \hat{\Pi} \quad (3.27)$$

On a en outre :

$$\langle \tilde{\Phi}_i | \hat{\hat{H}} | \tilde{\Phi}_j \rangle = \langle \Phi_i | \hat{\Pi}^2 \hat{H} \hat{\Pi}^2 | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle \quad (3.28)$$

d'où il résulte que

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \hat{\hat{H}} | \tilde{\Psi} \rangle \quad (3.29)$$

Termes $\langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle$ et $\langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \Psi \rangle$

Si nous utilisons le Hamiltonien (3.21) pour calculer le terme $\langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle$, nous aurons à calculer une somme d'éléments de matrice s'écrivant comme suit :

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle + \chi_0 \sum_k^N \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + \chi_0 \sum_k^N \chi_2^{(k)} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle \\
 &+ \sum_{k,l=1}^{N-1} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

où la somme sur k et l porte sur les $N - 1$ différentes configurations de diffusion d'une paire $|\Phi_2\rangle$ (la taille de la base à plusieurs corps étant N). Les sommes sur $N - 1$ termes peuvent être divisées en deux parties : N^* termes correspondant aux cas où la matrice \mathbf{d} de recouvrement des états à plusieurs corps impliqués a un déterminant nul et N^{**} termes où ce déterminant est non nul. Dans cet esprit, on va réécrire l'équation (3.30) comme :

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle + \chi_0 \sum_k^{N^*} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + \chi_0 \sum_k^{N^{**}} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle \\
 &+ \chi_0 \sum_{l=1}^{N^*} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(l)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle + \chi_0 \sum_{l=1}^{N^{**}} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(l)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N^*} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle + \sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N^{**}} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle \\
 &+ \sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

Chaque terme de l'équation précédente sera calculé dans la suite. Des éléments de matrice sont présentés dans la Table 3.1 à titre d'exemple pour le ^{222}Ra calculé avec la force SIII pour $q_2 = 13\text{b}$ et $q_3 = 20\text{fm}^3$. On constate que les éléments de matrice du type $\langle \mathbf{A} | \hat{H} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle$ où $\mathbf{A} \neq \mathbf{B}$ et $D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}} \neq 0$ sont très petits (de l'ordre de 10^{-3} MeV) par rapport aux autres (qui peuvent atteindre quelques 10^3 MeV). On va négliger les premiers termes dans le présent travail. Ceci conduit à réécrire (3.31) comme :

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle + \chi_0 \sum_k^{N^*} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + \chi_0 \sum_l^{N^*} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(l)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N^*} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle + \sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

On peut montrer que les éléments de matrice d'opérateurs à 1 corps comme \hat{H}_1 et $\hat{\delta}_m$ entre le vide $|\Phi_0\rangle$ et des états $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ ou entre des états $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ et $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ avec $k \neq l$, seront nuls. En effet deux cas se présentent. Ou bien la matrice de recouvrement $D_{\Phi_0\Phi_2^{(k)}}$ ou $D_{\Phi_2^{(k)}\Phi_2^{(l)}}$ est

Eléments de matrice	$D_{\mathbf{A}\tilde{\mathbf{B}}}$	Energie (MeV)
$\chi_0^2 \langle \Phi_0 \hat{H} - C\hat{1} \tilde{\Phi}_0 \rangle$	$D_{\Phi_0 \tilde{\Phi}_0} \neq 0$	-2184.9
$\chi_0 \sum_k^{N^*} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 \hat{H} - C\hat{1} \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$	$D_{\Phi_0 \tilde{\Phi}_2} = 0$	-2.3
$\chi_0 \sum_k^{N^{**}} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 \hat{H} - C\hat{1} \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$	$D_{\Phi_0 \tilde{\Phi}_2} \neq 0$	$\sim -10^{-3}$
$\sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N^*} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} \hat{H} - C\hat{1} \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle$	$D_{\Phi_2^{(k)} \tilde{\Phi}_2^{(l)}} = 0$	-1.3
$\sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N^{**}} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} \hat{H} - C\hat{1} \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle$	$D_{\Phi_2^{(k)} \tilde{\Phi}_2^{(l)}} \neq 0$	$\sim -10^{-3}$
$\sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 \langle \Phi_2^{(k)} \hat{H} - C\hat{1} \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$	$D_{\Phi_2^{(k)} \tilde{\Phi}_2^{(k)}} \neq 0$	-1325.1

TABLE 3.1 – Contributions de différents termes de la somme (3.31) à l'élément de matrice $\langle \Psi | \hat{H} - C\hat{1} | \tilde{\Psi} \rangle$ pour le ^{222}Ra calculé avec l'interaction SIII pour $q_2 = 13\text{b}$ et $q_3 = 20\text{fm}^3$. On notera que $C=1828.3\text{MeV}$.

régulière ou bien elle ne l'est pas. Si elle est régulière, on a vu (cf. l'exemple de la Table 3.1) que la contribution de ce type d'éléments de matrice à l'élément de matrice $\langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle$ peut être négligée. Il ne reste donc qu'à considérer le cas où la matrice de recouvrement est singulière. Dans ce cas, on peut reprendre l'argumentation développée au chapitre 2 (correspondant en pratique au cas où les dimensions des blocs de Ω donnés ne sont pas identiques dans les deux états considérés). On peut montrer que le mineur d'ordre 1 de la matrice de recouvrement ne bloquant qu'une seule ligne et qu'une seule colonne ne peut contrecarrer l'annulation provoquée par le fait que les dimensions de certains blocs sont différents par au moins deux unités dans les deux déterminants de Slater. Les éléments de matrice des opérateurs à 1 corps \hat{H}_1 et $\hat{\delta}_m$ sont donc identiquement nuls. Ceci permet de simplifier encore l'équation (3.32) en

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle + \chi_0 \sum_k^{N^*} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + \chi_0 \sum_l^{N^*} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(l)} | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_0 \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N^*} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle + \sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

Comme $[\hat{\delta}, \hat{\Pi}] = 0$ et compte tenu du caractère réel des éléments de matrice, on obtient finalement :

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle + 2\chi_0 \sum_k^{N^*} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + \sum_{\substack{k,l=1 \\ k \neq l}}^{N^*} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle \\
 &+ \sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

A cause de l'équation (3.24), on a $\langle \mathbf{A} | \hat{H} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle \neq \langle \tilde{\mathbf{A}} | \hat{H} | \mathbf{A} \rangle$ où $|\mathbf{A}\rangle$ est l'état $|\Phi_0\rangle$ ou l'un des états $|\Phi_2\rangle$. Ceci conduit à ce que $\langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle \neq \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \Psi \rangle$. Pour avoir un Hamiltonien qui commute avec la parité nous allons donc choisir $\forall q_3$ à q_2 donné le Hamiltonien \hat{H}_1 correspondant à la solution $|\Phi_0(q_2, q_3 = 0)\rangle$.

Le champ à un corps $\hat{\delta}_m$ est défini comme dans l'équation (3.9) à partir des états occupés de $|\Phi_0\rangle$

$$\langle \phi_i | \hat{\delta}_m | \psi'_j \rangle = \sum_k^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \widetilde{\psi'_j \psi'_k} \rangle \tag{3.35}$$

Ce champ sera utilisé pour définir \hat{V}_{res} . Nous allons montrer maintenant que

$$\langle \mathbf{A} | \hat{\delta}_m | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \langle \tilde{\mathbf{A}} | \hat{\delta}_m | \mathbf{A} \rangle \tag{3.36}$$

D'après les équations (2.52) :

$$\langle \mathbf{A} | \hat{\delta}_m | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \left[\sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \langle \phi_i | \hat{\delta}_m | \psi'_i \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle \tag{3.37}$$

où $|\psi'_i\rangle = \sum_m^{t_{\tilde{\mathbf{A}}}} |\psi_m\rangle (d^{-1})_{mi}$ avec $d_{ij} = \langle \phi_i | \psi_j \rangle$ ($|\phi_i\rangle \in |\mathbf{A}\rangle$ et $|\psi_j\rangle \in |\tilde{\mathbf{A}}\rangle$). Utilisant la définition (3.35), on obtient :

$$\langle \mathbf{A} | \hat{\delta}_m | \tilde{\mathbf{A}} \rangle = \left[\sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \sum_k^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \widetilde{\psi'_i \psi'_k} \rangle \right] \langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{A}} \rangle \tag{3.38}$$

où $|\psi'_k\rangle = \sum_n^{t_{\tilde{\Phi}_0}} |\psi_n\rangle (d^{o-1})_{nk}$ avec $d_{ij}^o = \langle \phi_i | \psi_j \rangle$ ($|\phi_i\rangle \in |\Phi_0\rangle$ et $|\psi_j\rangle \in |\tilde{\Phi}_0\rangle$).

D'autre part

$$\langle \tilde{\mathbf{A}} | \hat{\delta}_m | \mathbf{A} \rangle = \left[\sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \langle \psi'_i | \hat{\delta}_m | \phi_i \rangle \right] \langle \tilde{\mathbf{A}} | \mathbf{A} \rangle \quad (3.39)$$

où $\langle \psi'_i | = \sum_m^{t_{\tilde{\mathbf{A}}}} \langle \psi_m | [(d^{-1})_{mi}]^* = \sum_m^{t_{\tilde{\mathbf{A}}}} \langle \psi_m | (d^{-1})_{mi}$ puisque la matrice \mathbf{d} est réelle (cf. annexe C). Utilisant la définition (3.35), on a :

$$\langle \psi'_i | \hat{\delta}_m | \phi_i \rangle = \sum_{lk}^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_l | \hat{\rho}^{00} | \psi'_k \rangle \langle \psi'_i \psi'_k | \hat{\delta} | \widetilde{\phi_i \phi_l} \rangle = \sum_k^{t_{\Phi_0}} \langle \psi'_i \psi'_k | \hat{\delta} | \widetilde{\phi_i \phi_k} \rangle \quad (3.40)$$

où $\langle \psi'_k | = \sum_n^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \langle \psi_n | [(d^{o-1})_{nk}]^* = \sum_n^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \langle \psi_n | (d^{o-1})_{nk}$ puisque la matrice \mathbf{d}^o est réelle (cf. annexe C). Donc

$$\langle \tilde{\mathbf{A}} | \hat{\delta}_m | \mathbf{A} \rangle = \left[\sum_i^{t_{\mathbf{A}}} \sum_k^{t_{\Phi_0}} \langle \psi'_i \psi'_k | \hat{\delta} | \widetilde{\phi_i \phi_k} \rangle \right] \langle \tilde{\mathbf{A}} | \mathbf{A} \rangle \quad (3.41)$$

En comparant les deux équations (3.38) et (3.41) notant que $[\hat{\delta}, \hat{\Pi}] = 0$ on obtient la propriété annoncée en (3.36). Il en résulte que pour le Hamiltonien

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{\delta} - \hat{\delta}_m + C\hat{1} \quad (3.42)$$

on a

$$\langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (3.43)$$

En utilisant les équations (3.29) et (3.43) on peut réécrire l'énergie projetée (3.16) comme :

$$E_p = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle + p \langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle}{(1 + p \langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle)} \quad (3.44)$$

En introduisant

$$\Omega_p = p \frac{\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle}{1 + p \langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle} \quad \text{avec } p = \pm 1 \quad (3.45)$$

on obtient :

$$E_p = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle + \Omega_p \left(\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle}{\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle} - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \right) \quad (3.46)$$

Comme nous ne traitons pas l'interaction à 2 corps neutron-proton et que les opérateurs à 1 corps considérés conservent la charge, les éléments de matrice suivants seront toujours nuls dans notre cas :

$$\langle i_n | \hat{\theta}_1 | j_p \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle i_n j_p | \hat{\theta}_2 | \widetilde{k_n l_p} \rangle = 0 \quad (3.47)$$

où $\hat{\theta}_1$ et $\hat{\theta}_2$ sont respectivement des opérateurs à 1 et à 2 corps. Les états individuels $|i_n\rangle, |i_p\rangle$ sont des états respectivement de neutrons et de protons. En conséquence nous ne considérons ici que des configurations $|\Phi_i\rangle$ qui correspondent à des excitations seulement de neutrons ou de protons à partir de l'état fondamental non perturbé $|\Phi_0\rangle$. Ceci permet d'écrire la fonction d'onde nucléaire comme un produit de deux fonctions d'onde corrélées pour chaque état de charge noté par τ

$$|\Psi\rangle \equiv \prod_{\tau} |\Psi_{\tau}\rangle \quad (3.48)$$

Le Hamiltonien \hat{H} pourra donc s'écrire comme (τ et τ' représentant les deux états de charge)

$$\hat{H} \approx \hat{H}^{(\tau)} \cdot \hat{1} + \hat{H}^{(\tau')} \cdot \hat{1} \quad (3.49)$$

où $\hat{H}^{(\tau)}$ implique seulement des éléments de matrice entre états de même charge, c'est-à-dire de type $\langle i_{\tau} | \hat{\theta}_1 | j_{\tau} \rangle$ et $\langle i_{\tau} i_{\tau} | \hat{\theta}_2 | \widetilde{k_{\tau} l_{\tau}} \rangle$ où $|i_{\tau}\rangle$ est un état individuel pour un état de charge τ . En utilisant (3.48) et (3.49) on obtient :

$$\langle \Psi | \widetilde{\Psi} \rangle = \prod_{\tau} \langle \Psi_{\tau} | \widetilde{\Psi}_{\tau} \rangle \quad (3.50)$$

et

$$\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \widetilde{\Psi} \rangle}{\langle \Psi | \widetilde{\Psi} \rangle} = \sum_{\tau} \frac{\langle \Psi_{\tau} | \hat{H} | \widetilde{\Psi}_{\tau} \rangle}{\langle \Psi_{\tau} | \widetilde{\Psi}_{\tau} \rangle} \quad (3.51)$$

Le problème est alors découpé en deux parties séparées pour les protons et les neutrons. Finalement, l'énergie projetée est donnée par :

$$E_p = \sum_{\tau} \langle \Psi_{\tau} | \hat{H} | \Psi_{\tau} \rangle + \Omega_p \sum_{\tau} \left(\frac{\langle \Psi_{\tau} | \hat{H} | \widetilde{\Psi}_{\tau} \rangle}{\langle \Psi_{\tau} | \widetilde{\Psi}_{\tau} \rangle} - \langle \Psi_{\tau} | \hat{H} | \Psi_{\tau} \rangle \right) \quad (3.52)$$

$$\text{où } \Omega_p = p \frac{\prod_{\tau} \langle \Psi_{\tau} | \widetilde{\Psi}_{\tau} \rangle}{1 + p \prod_{\tau} \langle \Psi_{\tau} | \widetilde{\Psi}_{\tau} \rangle}.$$

3.3 Energie non projetée $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$

Les configurations $|\Phi_k\rangle$ pour un état de déformation (q_2, q_3) sont des états propres de \hat{H}_1 donc :

$$\hat{H}_1 |\Phi_k\rangle = E_{\text{p-h}}^{(k)} |\Phi_k\rangle \quad (3.53)$$

où $E_{\text{p-h}}^{(k)}$ est l'énergie d'excitation particule-trou de l'état $|\Phi_k\rangle$ par rapport au l'état $|\Phi_0\rangle$. Les éléments de matrice de \hat{H} s'expriment dans cette base selon :

$$\langle \Phi_k | \hat{H} | \Phi_l \rangle = \delta_{kl} [\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle + E_{\text{p-h}}^{(k)} + C] + \langle \Phi_k | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_l \rangle \quad (3.54)$$

3.3.1 Eléments de matrice diagonaux

Considérons l'élément de matrice diagonal H_{kk} . D'après (3.54), on a :

$$H_{kk} = \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle + E_{\text{p-h}}^{(k)} + C + \langle \Phi_k | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_k \rangle \quad (3.55)$$

Grâce aux formules (1.124) et (1.128) nous avons :

$$\langle \Phi_k | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_k \rangle = \frac{1}{2} \left[\sum_{ij}^{t(\Phi_k)} + \sum_{ij}^{p(\Phi_k)} - 2 \sum_i^{t(\Phi_k)} \sum_j^{p(\Phi_k)} \right] \langle ij | \hat{\delta} | \widetilde{ij} \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ij}^{t\Phi_0} \langle ij | \hat{\delta} | \widetilde{ij} \rangle \quad (3.56)$$

D'autre part on sait que

$$\frac{1}{2} \sum_{ij}^{t\Phi_0} \langle ij | \hat{\delta} | \widetilde{ij} \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \Phi_0 \rangle \quad (3.57)$$

Il en résulte que

$$H_{00} = \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \Phi_0 \rangle + C \quad (3.58)$$

et que H_{kk} s'écrira

$$H_{kk} = H_{00} + E_{\text{p-h}}^{(k)} + \frac{1}{2} \left[\sum_{ij}^{t(\Phi_k)} + \sum_{ij}^{p(\Phi_k)} - 2 \sum_i^{t(\Phi_k)} \sum_j^{p(\Phi_k)} \right] \langle ij | \hat{\delta} | \widetilde{ij} \rangle \quad (3.59)$$

3.3.2 Eléments de matrice non-diagonaux

Comme les états $|\Phi_l\rangle$ diffèrent toujours de $|\Phi_k\rangle$ par deux nucléons soit (pour préciser les notations) $|\Phi_l\rangle = a_{y'}^\dagger a_{z'}^\dagger a_y a_z |\Phi_k\rangle$, il est clair que :

$$\langle \Phi_k | \hat{H}_1 | \Phi_l \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \Phi_k | \hat{\delta}_1 | \Phi_l \rangle = 0 \quad (3.60)$$

et par ailleurs on sait que

$$\langle \Phi_k | \hat{\delta} | \Phi_l \rangle = \langle yz | \hat{\delta} | \widetilde{z'y'} \rangle \quad (3.61)$$

L'élément de matrice H_{kl} s'écrit donc dans ce cas :

$$H_{kl} = \langle \Phi_k | \hat{V}_{\text{res}} | \Phi_l \rangle = \langle \Phi_k | \hat{\delta} | \Phi_l \rangle = \langle yz | \hat{\delta} | \widetilde{z'y'} \rangle \quad (3.62)$$

3.4 Recouvrement $\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle$

On rappelle que la fonction d'onde HTDA dans le modèle simplifié est :

$$|\Psi\rangle = \chi_0 |\Phi_0\rangle + \sum_k^{N-1} \chi_2^{(k)} |\Phi_2^{(k)}\rangle \quad (3.63)$$

où N est la taille de la base à N corps et que sa transformation par l'opérateur de parité s'écrit :

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{\Pi} |\Psi\rangle = \chi_0 |\tilde{\Phi}_0\rangle + \sum_k^{N-1} \chi_2^{(k)} |\tilde{\Phi}_2^{(k)}\rangle \quad (3.64)$$

où l'indice k porte sur les $N - 1$ configurations $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ de type diffusion d'une paire. Le recouvrement entre $|\Psi\rangle$ et $|\tilde{\Psi}\rangle$ est alors :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle + 2\chi_0 \sum_{k=1}^{N-1} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + \sum_{k,l=1}^{N-1} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle \\ &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle + 2\chi_0 \sum_{k=1}^{N-1} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + 2 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^{k-1} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle \\ &\quad + \sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 \langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle \end{aligned} \quad (3.65)$$

Recouvrement $\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle$

En utilisant l'équation (2.38) on a :

$$\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \det \mathbf{d} \quad (3.66)$$

où la matrice \mathbf{d} est définie par $d_{ij} = \langle \phi_i | \psi_j \rangle$ ($|\phi_i\rangle$ étant un état occupé dans $|\Phi_0\rangle$, $|\psi_j\rangle$ occupé dans $|\tilde{\Phi}_0\rangle$). Grâce à l'invariance par reversement du sens du temps on peut introduire la sous-matrice E et sa conjuguée E^* (cf. annexe C) correspondant chacune à la moitié de l'espace des états physiques à 1 corps (l'autre moitié représentant l'image de la première par renversement du sens du temps). Dans ce qui suit les états à un corps $|\varphi_i\rangle$ servant à définir la matrice E ont la symétrie axiale et sont tels que $\Omega_i = \langle \varphi_i | \hat{j}_z | \varphi_i \rangle$ soit positif.

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E^* \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

Ceci permet d'écrire

$$\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle = |\det E|^2 \quad (3.68)$$

Recouvrement $\langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$

On définit la matrice C de façon analogue à E par :

$$C_{ij} = \langle \phi_i | \psi_j \rangle \quad (3.69)$$

où $\Omega_i > 0$ et $\Omega_j > 0$, les états $|\phi_i\rangle$ étant occupés dans $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ et $|\psi_j\rangle$ dans $|\tilde{\Phi}_2^{(k)}\rangle$. Il en résulte que

$$\langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle = |\det C|^2 \quad (3.70)$$

Recouvrement $\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_2 \rangle$

Dans le cas où l'état $|\Phi_2\rangle$ correspond à une diffusion d'une paire et où avec les notations de la Figure 3.1 on a $\Omega_k \neq \Omega_{k'}$. Il est évident d'après l'équation (2.46) que :

$$\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_2 \rangle = 0 \quad (3.71)$$

On définit la matrice $F_{ij} = \langle \phi_i | \psi_j \rangle$ ($|\phi_i\rangle$ étant occupé dans $|\Phi_0\rangle$ avec $\Omega_i > 0$ et $|\psi_j\rangle$ étant occupé dans $|\tilde{\Phi}_2\rangle$) ce qui permet d'écrire :

$$\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_2 \rangle = |\det F|^2 \quad (3.72)$$

Recouvrement $\langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle (k \neq l)$

On peut avoir dans cette situation les états $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ et $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ qui diffèrent par une ou deux paires d'états occupés. Il faut considérer deux cas :

- ou bien les dimensions des différents blocs correspondant à chacune des valeurs propres de \hat{j}_z ne sont pas identiques, alors

$$\langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle = 0 \quad (3.73)$$

- ou bien ces dimensions sont identiques et on a

$$\langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle = |\det R|^2 \quad (3.74)$$

où

$$R_{ij} = \langle \phi_i | \psi_j \rangle \quad (3.75)$$

avec $|\phi_i\rangle$ état occupé dans $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ avec $\Omega_i > 0$ et $|\psi_j\rangle$ état occupé dans $|\tilde{\Phi}_2^{(l)}\rangle$ avec $\Omega_j > 0$.

Au total, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle &= \chi_0^2 \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle + 2\chi_0 \sum_{k=1}^{N-1} \chi_2^{(k)} \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle + 2 \sum_{k,l=1}^{N-1} X_{kl} \chi_2^{(k)} \chi_2^{(l)} \langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle \\ &\quad + \sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 \langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle \end{aligned} \quad (3.76)$$

où $X_{kl} = 1$ quand on est dans le cas considéré en (3.74) et $X_{kl} = 0$ sinon.

Dans le cas limite on obtient :

$$\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle = 1, \quad \langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle = 1 \quad (3.77)$$

$$\langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle = 0, \quad \langle \Phi_2^{(k)} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle = 0 \quad \text{quand } k \neq l \quad (3.78)$$

et donc on trouve bien

$$\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle = \chi_0^2 + \sum_{k=1}^{N-1} (\chi_2^{(k)})^2 = 1 \quad (3.79)$$

3.5 Éléments de matrice $\langle \Psi | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle$

Ces éléments de matrice vont être calculés au moyen de l'équation (3.34). Ceci conduit à calculer quatre types d'éléments de matrice : $\langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle$, $\langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$, $\langle \Phi_2^{(k)} | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(l)} \rangle (k \neq l)$ et $\langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$.

3.5.1 Éléments de matrice $\langle \Phi_0 | \hat{H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle$

Terme $\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \tilde{\Phi}_0 \rangle$

En utilisant l'équation (2.52), on a :

$$\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \left[\sum_i^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i | \hat{h}_1 | \psi'_i \rangle \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.80)$$

avec

$$|\psi'_i\rangle = \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_0}} |\psi_j\rangle (d^{-1})_{ji} \quad (3.81)$$

où la matrice \mathbf{d} définie par $d_{mn} = \langle \phi_m | \psi_n \rangle$ (où $|\phi_m\rangle$ est un état occupé dans $|\Phi_0\rangle$ et $|\psi_n\rangle$ un état occupé dans $|\tilde{\Phi}_0\rangle$). Nous obtenons avec les notations de l'annexe A pour les nombres quantiques de la B.O.H.S.A.

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \tilde{\Phi}_0 \rangle &= \left[\sum_i^{t_{\Phi_0}} \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \langle \phi_i | \hat{h}_1 | \psi_j \rangle (d^{-1})_{ji} \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \\ &= \left[\sum_i^{t_{\Phi_0}} \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \sum_{\alpha\alpha'} C_\alpha^{(i)} C_{\alpha'}^{(j)} \langle \alpha | \hat{h}_1 | \alpha' \rangle (-)^{n'_z + \Lambda'} (d^{-1})_{ji} \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.82)$$

Définissant :

$$\tilde{\rho}_{\alpha\alpha'} = 2 \sum_{\substack{i \in \Phi_0 \\ \Omega_i > 0}} \sum_{\substack{j \in \tilde{\Phi}_0 \\ \Omega_j = \Omega_i}} C_\alpha^{(i)} C_{\alpha'}^{(j)} (d^{-1})_{ji} \quad (3.83)$$

on a finalement

$$\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \left[\sum_{\alpha\alpha'} \tilde{\rho}_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | \hat{h}_1 | \alpha' \rangle (-)^{n'_z + \Lambda'} \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.84)$$

Terme $\langle \Phi_0 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_0 \rangle$

En utilisant l'équation (2.52), on a :

$$\langle \Phi_0 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \left[\sum_i^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i | \hat{\delta}_m | \psi'_i \rangle \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.85)$$

avec

$$|\psi'_i\rangle = \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_0}} |\psi_j\rangle (d^{-1})_{ji}, \quad |\psi'_k\rangle = \sum_l^{t_{\tilde{\Phi}_0}} |\psi_l\rangle (d^{-1})_{lk} \quad (3.86)$$

où $\hat{\delta}_m$ est défini par l'équation (3.35). Donc :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_0 \rangle &= \left[\sum_{ik}^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \widetilde{\psi'_i \psi'_k} \rangle \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \\ &= \sum_{ik}^{t_{\Phi_0}} \left[\langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \psi'_i \psi'_k \rangle - \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \psi'_k \psi'_i \rangle \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.87)$$

On en déduit le terme direct :

$$W^{(d)} = \left[\sum_{ik}^{t_{\Phi_0}} \sum_{jl}^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \psi_j \psi_l \rangle (d^{-1})_{ji} (d^{-1})_{lk} \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.88)$$

et le terme d'échange :

$$W^{(e)} = \left[\sum_{ik}^{t_{\Phi_0}} \sum_{jl}^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \psi_l \psi_j \rangle (d^{-1})_{ji} (d^{-1})_{lk} \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.89)$$

On désigne par χ l'ensemble des variables $\{\mathbf{r}, \sigma\}$. L'élément de matrice non antisymétrisé de l'opérateur $\hat{\delta}$ est noté dans la représentation χ par $\langle \chi_1 \chi_2 | \hat{\delta} | \chi_3 \chi_4 \rangle$. En utilisant la définition de la densité mixte (2.92) on a

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_0 \rangle = W &= W^{(d)} + W^{(e)} \\ &= \int \prod_{i=1}^4 d\chi_i \langle \chi_1 \chi_2 | \hat{\delta} | \chi_3 \chi_4 \rangle \left[\tilde{\rho}(\mathbf{r}_3 \sigma_3, \mathbf{r}_1 \sigma_1) \tilde{\rho}(\mathbf{r}_4 \sigma_4, \mathbf{r}_2 \sigma_2) \right. \\ &\quad \left. - \tilde{\rho}(\mathbf{r}_4 \sigma_4, \mathbf{r}_1 \sigma_1) \tilde{\rho}(\mathbf{r}_3 \sigma_3, \mathbf{r}_2 \sigma_2) \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.90)$$

Pour calculer un élément de matrice antisymétrisé de $(1 - P_\sigma) \hat{\delta}$, il suffit de calculer un élément de matrice direct de $(1 - P_\sigma)(1 - P_\sigma P_\tau P_M) \delta$ où P_σ, P_τ et P_M sont respectivement les opérateurs d'échange de spin, d'isospin et d'espace. L'interaction $\hat{\delta}$ est paire dans la variable d'espace relative. Donc pour ce qui est de son action sur un état à deux corps, on a $P_M \equiv 1$. On néglige les interactions neutron-proton donc l'interaction $\hat{\delta}$ n'agit que sur des états à 2 corps $T = 1$ pour lesquels $P_\tau = 1$. Il en résulte que pour nos calculs

$$(1 - P_\sigma)(1 - P_\sigma P_\tau P_M) \hat{\delta} \equiv 2(1 - P_\sigma) \delta \quad (3.91)$$

En conséquence pour l'interaction $\hat{\delta}$ définie en (1.104)

$$\hat{\delta} = \frac{\delta_0^\tau}{2} (1 - P_\sigma) \hat{\delta}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (3.92)$$

on aura $W = W^{(d)} + W^{(e)} = 2W^{(d)}$ et donc compte tenu de

$$\begin{aligned} \langle \chi_1 \chi_2 | \hat{\delta} | \chi_3 \chi_4 \rangle &= \frac{\delta_0^\tau}{4} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4) \\ &\quad \times \left(\delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} - \langle \sigma_1 | \vec{\sigma} | \sigma_3 \rangle \cdot \langle \sigma_2 | \vec{\sigma} | \sigma_4 \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.93)$$

définissant la densité mixte spin-scalaire par

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \sum_i^{t_{\Phi_0}} \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_j(\mathbf{r}, \sigma) (\tilde{d}^{-1})_{ij} \quad (3.94)$$

et spin-vectorielle par

$$\vec{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma\sigma'} \tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}\sigma') \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle \quad (3.95)$$

où $\tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}\sigma')$ est donné par

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}\sigma') = \sum_i^{t_{\Phi_0}} \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_j(\mathbf{r}, \sigma') (\tilde{d}^{-1})_{ij} \quad (3.96)$$

on a

$$W^{(d)} = \frac{\delta_0^\tau}{4} \int d^3\mathbf{r} ([\tilde{\rho}(\mathbf{r})]^2 - [\vec{\rho}(\mathbf{r})]^2) \quad (3.97)$$

La matrice densité $\vec{\rho}(\mathbf{r})$ correspondant à un déterminant de Slater invariant par renversement du sens du temps est identiquement nulle. Pour une densité mixte (même entre états dont chacun est pair par renversement du sens du temps) ce n'est plus le cas. Cependant, l'apparition de la partie spin-vectorielle de $\hat{\rho}$ rend nos calculs compliqués. En plus comme la contribution de la partie spin-scalaire est beaucoup plus grande que celle de spin-vectorielle en général pour l'énergie et ne change que les propriétés magnétiques, nous ferons l'approximation de ne pas la considérer. Il résulte de ce qui précède que

$$\langle \Phi_0 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \left[\frac{\delta_0^\tau}{2} \int d^3\mathbf{r} [\tilde{\rho}(\mathbf{r})]^2 \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.98)$$

Terme $\langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_0 \rangle$

En utilisant l'équation (??) on a :

$$\langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \frac{1}{2} \langle \Phi_0 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_0 \rangle = \left[\frac{\delta_0^\tau}{4} \int d^3\mathbf{r} [\tilde{\rho}(\mathbf{r})]^2 \right] \langle \Phi_0 | \tilde{\Phi}_0 \rangle \quad (3.99)$$

3.5.2 Eléments de matrice $\langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$

On a fait l'approximation consistant à ne calculer que les éléments de matrice pour lesquels $D_{\Phi_0 \tilde{\Phi}_2} = 0$. Utilisant l'équation (2.87) on obtient dans ce cas :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle &= \left[(-)^{i+i'+i''} \langle \phi_i \phi_{\bar{i}} | \hat{\delta} | \widetilde{\psi_{\bar{i}'} \psi_{i'}} \rangle \right] D(i\bar{i} | \bar{i}' i') \\ &= \left[\langle \phi_i \phi_{\bar{i}} | \hat{\delta} | \widetilde{\psi_{\bar{i}'} \psi_{i'}} \rangle \right] D(i\bar{i} | \bar{i}' i') \end{aligned} \quad (3.100)$$

où $D(i\bar{i} | \bar{i}' i')$ est un mineur d'ordre 2 de la matrice \mathbf{d} définie par $d_{mn} = \langle \phi_m | \psi_n \rangle$ (où ϕ_m est un état occupé dans $|\Phi_0\rangle$ et ψ_n est un état occupé dans $|\tilde{\Phi}_2\rangle$). Grâce à l'invariance par renversement du sens du temps on peut écrire

$$D(i\bar{i}|\bar{i}'i') = [\bar{D}(i|i')]^2 \quad (3.101)$$

où $\bar{D}(i|i')$ est un mineur de la sous-matrice diagonale par blocs E de taille $N/2$ (où N est le nombre des états occupés dans $|\Phi_0\rangle$). Définissons $|\Phi_0(i)\rangle$ par

$$|\Phi_0(i)\rangle = ((N/2 - 1)!)^{-1/2} \det\{\phi_1, \dots, \phi_{i-1}, \phi_{i+1}, \dots, \phi_{N/2}\} \quad (3.102)$$

et donc

$$|\widetilde{\Phi_0(i)}\rangle = ((N/2 - 1)!)^{-1/2} \det\{\psi_1, \dots, \psi_{i-1}, \psi_{i+1}, \dots, \psi_{N/2}\} \quad (3.103)$$

Le mineur $\bar{D}(i|i')$ n'est évidemment rien d'autre que le recouvrement entre ces deux états $\bar{D}(i|i') = \langle \Phi_0(i) | \widetilde{\Phi_0(i')} \rangle$.

3.5.3 Éléments de matrice $\langle \Phi_2^{(k)} | \hat{\delta} | \widetilde{\Phi_2^{(l)}} \rangle (k \neq l)$

On peut voir que $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ et $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ diffèrent soit par une, soit par deux paires d'états occupés. Il faut donc considérer deux cas :

- ou bien $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ diffère de $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ par deux paires (cf. Figure 3.2). Donc $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ est obtenu à partir de $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ par

$$|\Phi_2^{(l)}\rangle = a_{i'''}^\dagger a_{\bar{i}'''}^\dagger a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_{i''} a_{\bar{i}''} a_{i'} a_{\bar{i}'} |\Phi_2^{(k)}\rangle \quad (3.104)$$

où les indices i, i', i'', i''' sont tous différents. En utilisant l'approche développée dans la section 2.3.2 on voit que dans ce cas

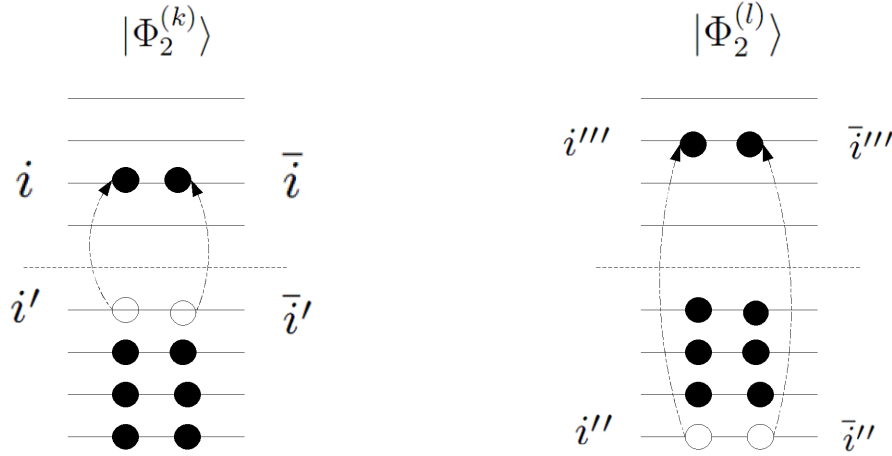
$$\langle \Phi_2^{(k)} | \hat{\delta} | \widetilde{\Phi_2^{(l)}} \rangle = 0 \quad (3.105)$$

puisque en utilisant le résultat de Löwdin pour les éléments de matrice à deux corps, on implique des mineurs à 2 corps qui ne bloquent que deux lignes et deux colonnes alors que quatre sous-blocs de Ω différents ont des dimensions différentes de deux dans la matrice de recouvrement.

- ou bien $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ diffère de $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ par une seule paire. Il y a deux possibilités. La première est que les deux configurations soient obtenues par l'excitation d'une paire à partir du même état de trou qui est transférée dans deux états différents de particules à partir du même vide $|\Phi_0\rangle$ pour $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ et $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ (cf. Figure 3.3). Donc $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ peut être déduit de $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ par :

$$|\Phi_2^{(l)}\rangle = a_{i'}^\dagger a_{\bar{i}'}^\dagger a_{i''} a_{\bar{i}''} |\Phi_2^{(k)}\rangle \quad (3.106)$$

où l'état i' est différent de l'état i'' . Huit cas se présentent ici résultant de la comparaison des trois nombres quantiques $\Omega_i, \Omega_{i'}, \Omega_{i''}$. Si $D_{\Phi_2^{(k)}\Phi_2^{(l)}} \neq 0$ on a vu précédemment qu'on pouvait


 FIGURE 3.2 – Etat $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ différent de $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ par deux paires

négliger la contribution de cet élément de matrice à l'énergie. Au contraire dans le cas $D_{\Phi_2^{(k)}\Phi_2^{(l)}} \neq 0$, on obtient en utilisant l'équation (2.87)

$$\begin{aligned} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{\delta} | \widetilde{\Phi_2^{(l)}} \rangle &= \langle \phi_{i'} \phi_{\bar{i}'} | \hat{\delta} | \widetilde{\psi_{i''} \psi_{i''}} \rangle D(i' i' | \bar{i}'' i'') \\ &= [\bar{D}(i | i'')]^2 \end{aligned} \quad (3.107)$$

où

$$\bar{D}(i' | i'') = \langle \Phi_0(i) | \widetilde{\Phi_0(i)} \rangle \quad (3.108)$$

avec

$$|\Phi_0(i)\rangle = ((N/2 - 1)!)^{-1/2} \det\{\phi_1, \dots, \phi_{i-1}, \phi_{i+1}, \dots, \phi_{N/2}\} \quad (3.109)$$

$$|\widetilde{\Phi_0(i)}\rangle = ((N/2 - 1)!)^{-1/2} \det\{\psi_1, \dots, \psi_{i-1}, \psi_{i+1}, \dots, \psi_{N/2}\} \quad (3.110)$$

La deuxième possibilité est que les deux configurations sont obtenues par l'excitation d'une paire à partir de deux états différents de trou (i', \bar{i}') et (i'', \bar{i}'') vers un même état de particule (i, \bar{i}) à partir du même vide $|\Phi_0\rangle$ pour $|\Phi_2^{(l)}\rangle$ et $|\Phi_2^{(k)}\rangle$ (cf. Figure 3.4).

$$|\Phi_2^{(l)}\rangle = a_{i'}^\dagger a_{\bar{i}'}^\dagger a_{i''} a_{\bar{i}''} |\Phi_2^{(k)}\rangle \quad (3.111)$$

où l'état i' est différent de l'état i'' . Il y a aussi huit cas. Le premier cas où $D_{\Phi_2^{(k)}\Phi_2^{(l)}} \neq 0$ sera négligé. Le reste où $D_{\Phi_2^{(k)}\Phi_2^{(l)}} = 0$ on obtient en utilisant l'équation (2.87) :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_2^{(k)} | \hat{\delta} | \widetilde{\Phi_2^{(l)}} \rangle &= \langle \phi_{i''} \phi_{\bar{i}''} | \hat{\delta} | \widetilde{\psi_{i'} \psi_{i'}} \rangle D(i'' i'' | \bar{i}' i') \\ &= \bar{D}(i'' | i') \end{aligned} \quad (3.112)$$

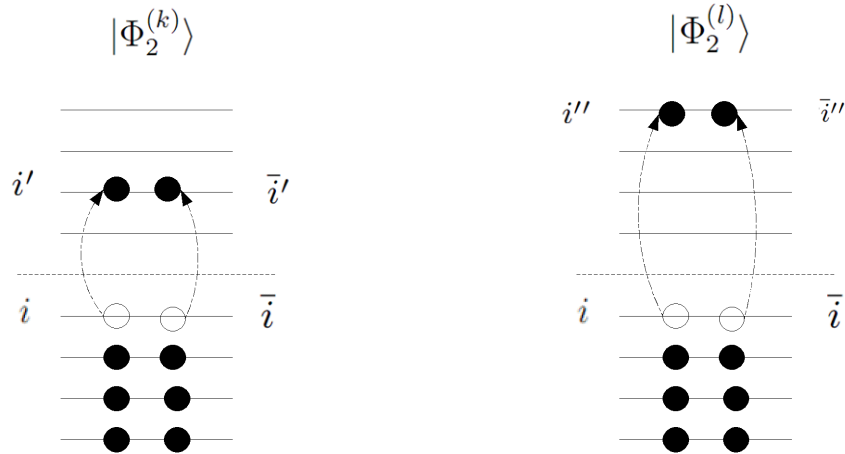


FIGURE 3.3 – Couples d'états d'excitation d'une paire à partir d'un même état de trou (i, \bar{i}) vers deux états différents de particule (i', \bar{i}') et (i'', \bar{i}'') .

où

$$\bar{D}(i''|i') = \langle \Phi_2(i'i'') | \widetilde{\Phi_2(i'i'')} \rangle \quad (3.113)$$

avec (pour préciser notre discussion illustrative nous considérerons que $i' < i''$)

$$|\Phi_2(i'i'')\rangle = ((N/2 - 1)!)^{-1/2} \det\{\phi_1, \dots, \phi_{i'-1}, \phi_{i'+1}, \dots, \phi_{i''-1}, \phi_{i''+1}, \dots, \phi_i, \dots, \phi_{N/2}\} \quad (3.114)$$

$$|\widetilde{\Phi_2(i'i'')}\rangle = ((N/2 - 1)!)^{-1/2} \det\{\psi_1, \dots, \psi_{i'-1}, \psi_{i'+1}, \dots, \psi_{i''-1}, \psi_{i''+1}, \dots, \psi_i, \dots, \psi_{N/2}\} \quad (3.115)$$

3.5.4 Éléments de matrice $\langle \Phi_2^{(k)} | \hat{H} | \tilde{\Phi}_2^{(k)} \rangle$

Pour simplifier l'écriture, nous notons $|\Phi_2\rangle \equiv |\Phi_2^{(k)}\rangle$

Terme $\langle \Phi_2 | \hat{H}_1 | \tilde{\Phi}_2 \rangle$

En utilisant l'équation (2.52) on a

$$\langle \Phi_2 | \hat{H}_1 | \tilde{\Phi}_2 \rangle = \left[\sum_{\alpha\alpha'} \tilde{\rho}_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | \hat{h}_1 | \alpha' \rangle (-)^{n'_z + \Lambda'} \right] \langle \Phi_2 | \tilde{\Phi}_2 \rangle \quad (3.116)$$

où

$$\tilde{\rho}_{\alpha\alpha'} = 2 \sum_{\substack{i \in \Phi_2 \\ \Omega_i > 0}} \sum_{\substack{j \in \tilde{\Phi}_2 \\ \Omega_j = \Omega_i}} C_{\alpha}^{(i)} C_{\alpha'}^{(j)} (d^{-1})_{ji} \quad (3.117)$$

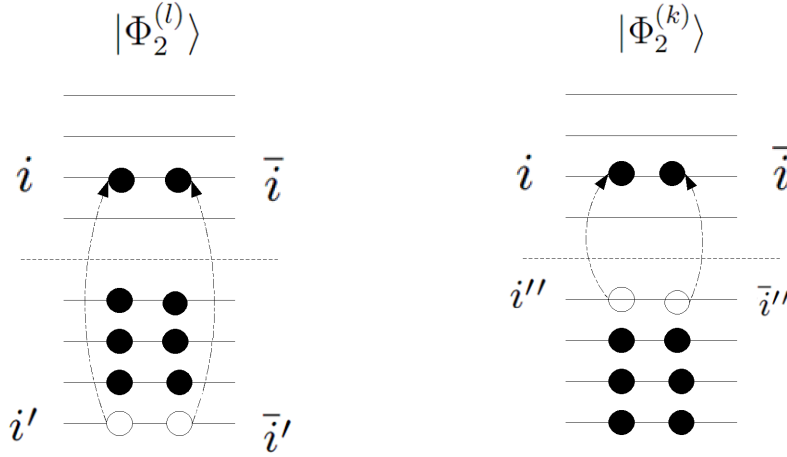


FIGURE 3.4 – Couples d'états d'excitation à partir de deux états différents de trou (i', \bar{i}') et (i'', \bar{i}'') vers un même état de particule (i, \bar{i}).

avec la matrice \mathbf{d} définie par $d_{mn} = \langle \phi_m | \psi_n \rangle$ ($|\phi_m\rangle$ état occupé dans $|\Phi_2\rangle$ et $|\psi_n\rangle$ état occupé dans $|\tilde{\Phi}_2\rangle$).

Terme $\langle \Phi_2 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_2 \rangle$

En utilisant l'équation (2.52) on a :

$$\langle \Phi_2 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_2 \rangle = \sum_i^{t_{\Phi_2}} \langle \phi_i | \hat{\delta}_m | \psi'_i \rangle \langle \Phi_2 | \tilde{\Phi}_2 \rangle \quad (3.118)$$

En utilisant la définition de $\hat{\delta}_m$ (équation (3.35))

$$\begin{aligned} \langle \Phi_2 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_2 \rangle &= \left[\sum_i^{t_{\Phi_2}} \sum_k^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \widetilde{\psi'_i \psi'_k} \rangle \right] \langle \Phi_2 | \tilde{\Phi}_2 \rangle \\ &= \left[\sum_i^{t_{\Phi_2}} \sum_k^{t_{\Phi_0}} \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \psi'_i \psi'_k \rangle - \langle \phi_i \phi_k | \hat{\delta} | \psi'_k \psi'_i \rangle \right] \langle \Phi_2 | \tilde{\Phi}_2 \rangle \end{aligned} \quad (3.119)$$

où

$$|\psi'_i\rangle = \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_2}} |\psi_j\rangle (e^{-1})_{ji}, \quad |\psi'_k\rangle = \sum_l^{t_{\tilde{\Phi}_0}} |\psi_l\rangle (d^{-1})_{lk} \quad (3.120)$$

avec la matrice \mathbf{e} définie par $e_{mn} = \langle \phi_m | \psi_n \rangle$ ($|\phi_m\rangle$ état occupé dans $|\Phi_2\rangle$ et $|\psi_n\rangle$ état occupé dans $|\tilde{\Phi}_2\rangle$). La matrice \mathbf{d} est définie par $d_{mn} = \langle \phi_m | \psi_n \rangle$ ($|\phi_m\rangle$ état occupé dans $|\Phi_0\rangle$ et $|\psi_n\rangle$ état occupé dans $|\tilde{\Phi}_0\rangle$). En effectuant des calculs similaires à ceux de la sous-section 3.5.1 avec la définition des deux matrices de densité mixte :

$$\tilde{\rho}^{22}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \sum_i^{t_{\Phi_2}} \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_2}} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_j(\mathbf{r}, \sigma) (\tilde{e}^{-1})_{ij} \quad (3.121)$$

$$\tilde{\rho}^{00}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \sum_i^{t_{\Phi_0}} \sum_j^{t_{\tilde{\Phi}_0}} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_j(\mathbf{r}, \sigma) (\tilde{d}^{-1})_{ij} \quad (3.122)$$

on obtient finalement

$$\langle \Phi_2 | \hat{\delta}_m | \tilde{\Phi}_2 \rangle = \left[\frac{\delta_0^\tau}{2} \int d^3\mathbf{r} \tilde{\rho}^{00}(\mathbf{r}) \tilde{\rho}^{22}(\mathbf{r}) \right] \langle \Phi_2 | \tilde{\Phi}_2 \rangle \quad (3.123)$$

Terme $\langle \Phi_2 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2 \rangle$

En utilisant l'équation (2.73) on a

$$\langle \Phi_2 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2 \rangle = \left[\frac{1}{2} \sum_{kl}^{t_{\Phi_2}} \langle \phi_k \phi_l | \hat{\delta} | \widetilde{\psi'_k \psi'_l} \rangle \right] \langle \Phi_2 | \tilde{\Phi}_2 \rangle \quad (3.124)$$

où

$$|\psi'_k\rangle = \sum_m^{t_{\tilde{\Phi}_2}} |\psi_m\rangle (g^{-1})_{mk}, \quad |\psi'_l\rangle = \sum_l^{t_{\tilde{\Phi}_2}} |\psi_n\rangle (g^{-1})_{nl} \quad (3.125)$$

avec la matrice \mathbf{g} définie par $g_{pq} = \langle \phi_p | \psi_q \rangle$ ($|\phi_p\rangle$ état occupé dans $|\Phi_2\rangle$ et $|\psi_q\rangle$ état occupé dans $|\tilde{\Phi}_2\rangle$). En utilisant la définition suivante de la densité mixte

$$\tilde{\rho}^{22}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \sum_k^{t_{\Phi_2}} \sum_l^{t_{\tilde{\Phi}_2}} \phi_k^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_l(\mathbf{r}, \sigma) (\tilde{g}^{-1})_{ij} \quad (3.126)$$

Nous obtenons finalement

$$\langle \Phi_2 | \hat{\delta} | \tilde{\Phi}_2 \rangle = \left[\frac{\delta_0^\tau}{4} \int d^3\mathbf{r} [\tilde{\rho}^{22}(\mathbf{r})]^2 \right] \langle \Phi_2 | \tilde{\Phi}_2 \rangle \quad (3.127)$$

CHAPITRE 4

Applications et Résultats

4.1 Introduction

L'existence de noyaux stables déformés a été mise en évidence très tôt dans l'histoire de la physique nucléaire. L'observation de grands moments quadrupôlares conduit à suggérer que ces noyaux ont la forme d'un ellipsoïde allongé ce qui a été confirmé par l'observation de bandes rotationnelles. La description de la plupart des noyaux comme ayant une déformation axiale et étant à symétrie de réflexion par rapport à un plan perpendiculaire à l'axe de symétrie est en général adaptée pour reproduire leurs spectres nucléaires. Grâce à la symétrie de réflexion par rapport au plan équatorial, tous les membres d'une bande rotationnelle ont la même parité. Cependant, la première observation d'un état collectif de parité moins dans les noyaux ^{224}Ra et ^{228}Th par le groupe de Berkeley en 1950 [82] a conduit à suggérer l'existence de noyaux en forme de poire. En effet, les spectres nucléaires associés aux déformations octupôlares présentent des caractéristiques différentes de celles des noyaux n'ayant que des déformations quadrupôlares. Par exemple, de tels noyaux possèdent en plus d'une bande de parité positive une bande de parité négative à basse énergie d'excitation, les deux bandes étant reliées par de fortes transitions E1. La valeur du moment dipolaire électrique est également expliquée dans ces noyaux par une position du centre de masse des protons différente de celle du centre de masse des neutrons. D'un point de vue microscopique, le mécanisme à l'origine de l'apparition des déformations octupôlares peut se comprendre à l'aide d'orbitales de Nilsson. De telles déformations apparaissent lorsque des orbitales différant par 3 unités de moment angulaire deviennent voisines près du niveau de Fermi. Ces orbitales seront alors couplées par une interaction de type $\sum_m Y_{3m} \cdot Y_{3\bar{m}}$. Les régions de la table de masse où on a le plus de chance de trouver de telles déformations octupôlares correspondent à des nombres de particules égaux environ à $N \simeq 34$ (région des Ge et Se), $N \simeq 56$ (Zr), $N \simeq 88$ (Ba et Sm), $N \simeq 134$ (Ra et Th).

L'approche macro-microscopique phénoménologique qui combine le modèle de la goutte liquide et la méthode de correction de couches de Strutinsky est l'outil le plus populaire pour analyser ces formes de noyaux [19]. Möller et Nilsson [55] l'ont utilisée pour la première fois avec un potentiel modifié d'oscillateur harmonique déformé pour calculer les barrières de fission. Ils ont trouvé une instabilité de la surface d'énergie potentielle de déformation en introduisant la déformation octupolaire au niveau de la seconde barrière de fission de quelques noyaux d'actinides. Des calculs similaires ont été ensuite effectués par Leander *et al.* [56] pour une étude systématique dans la région des noyaux Po-U. Le même type de calcul utilisant cette fois-ci le

potentiel de Woods-Saxon a été réalisé par Nazarewicz *et al.* [57] pour analyser l'instabilité des noyaux quand on tient compte de la déformation octupolaire dans la région des noyaux lourds comme $^{220-228}\text{Ra}$, $^{220-230}\text{Th}$ et $^{222-230}\text{U}$. Pour plus de détails sur les succès de cette méthode, le lecteur est invité à consulter par exemple les références [58, 59].

Il est important de souligner que la méthode macro-microscopique n'est pas une théorie auto-cohérente. Dans le cadre de la théorie auto-cohérente de champ moyen avec corrélations d'appariement Hartree-Fock-Bogoliubov, M. Brack et P. Quentin ont apporté en 1981 une justification microscopique à l'approche de V. M. Strutinsky [85]. Bien sur, le développement de la méthode microscopique nous a fourni un outil plus fondamental. Des calculs Hartree-Fock pour les noyaux légers manifestant une déformabilité octupolaire pour des noyaux avec $A \leq 30$ ont été effectués très tôt par Kelson [61] pour ^{16}O , par Krappe et Washweiler [62] pour ^{20}Ne et ^{24}Mg , par Giraud et Sauer [63] pour les noyaux ^{19}F , ^{20}Ne , ^{24}Mg et ^{28}Si .

Pour les noyaux lourds avec déformation octupolaire, en utilisant l'interaction effective phénoménologique de Skyrme SIII, Bonche *et al.* [64] ont effectué pour la première fois des calculs auto-cohérents HF+BCS pour l'état fondamental du noyau ^{222}Ra . Ils ont trouvé un minimum en énergie totale à une déformation octupolaire non nulle. Robledo et Egido [65] ont employé la même méthode HF+BCS avec l'interaction de Gogny pour étudier la déformation octupolaire dans l'état fondamental des noyaux $^{222,224}\text{Ra}$, ^{222}Th et $^{142-148}\text{Ba}$. En fixant la position du centre de masse, ils ont été capables de calculer le moment dipolaire intrinsèque de ces noyaux. Des calculs ont également été effectués par ce groupe pour des états de hauts spins des isotones définis par $N = 88$ [66]. Depuis, de nombreux calculs microscopiques ont été réalisés qui étaient basés sur la méthode HF+BCS pour étudier les noyaux pairs-pairs où la déformation octupolaire joue un rôle important, dans diverses régions de la table de masse : Zr [67], Ce-Nd-Sm [68], Ba [75, 72], Xe [72, 73], et les actinides [64, 74, 75]. Il est intéressant de noter qu'il n'y pas encore, à notre connaissance, d'étude dans ce domaine pour des noyaux impairs.

La déformation octupolaire est un des cas où une approche champ moyen n'est pas suffisante puisque dans beaucoup de cas on observe une grande déformabilité octupolaire plutôt que l'existence de minima bien marqués brisant la symétrie de réflexion. Bonche *et al.* [76] ont utilisé tout d'abord la méthode HF+BCS avec l'interaction de Skyrme SkM* pour étudier la déformation octupolaire de l'état fondamental et de l'état superdéformé du noyau ^{194}Pb . La Méthode de la Coordonnée Génératrice (GCM) suivie d'une projection sur les états de bonne parité a permis ensuite de proposer une énergie d'excitation octupolaire intrinsèque d'environ 2 MeV. Heenen *et al.* [72] ont utilisé une méthode similaire avec l'interaction de Skyrme SIII pour étudier l'excitation octupolaire dans la région du Xe et du Ba. Ils ont mis en évidence l'existence de fortes corrélations octupolaires dans cette région. Dans le contexte de la projection de la parité de HF+BCS, Egido et Robledo [65] ont montré l'importance de la projection

sur la parité pour la description de l'état de parité moins dans les actinides légers pair-pairs.

Les corrélations d'appariement sont importantes pour décrire les noyaux ayant une déformation octupolaire puisqu'elles ont, en général, tendance à rendre le système moins déformé octupolairement [59]. Au contraire, la déformation octupolaire réduira les corrélations d'appariement lorsque la densité de niveaux de la forme asymétrique sera plus faible par rapport à celle d'obtenue pour la forme symétrique par réflexion droite-gauche [58]. Comme nous le savons, le nombre de particules de la fonction d'onde intrinsèque de l'approximation de HF+BCS n'est assuré qu'en valeur moyenne [65, 76]. Ceci conduit dans le cadre de cette approximation, à des fonctions d'onde projetées sur des états de parité de bonne symétrie qui n'ont pas des bons nombres de particules. Il faut restaurer cette symétrie. La conséquence est d'avoir à presque doubler le temps de calcul. Face à cette difficulté, il a été souvent considéré que la déviation de la restauration de nombre de particule n'était pas une correction très importante ce qui permettait de traiter perturbativement ce problème [65].

Le présent chapitre de notre thèse est en fait consacré à une étude préliminaire de certains cas particuliers utilisant la méthode HTDA conservant le nombre de particules avec projection sur la parité. Pour ce faire, nous avons étudié dans l'ordre les noyaux suivants : ^{194}Pb dans ses états fondamental et superdéformé ($^{194}\text{PbSD}$), ^{222}Ra au fondamental et ^{240}Pu au voisinage de la seconde barrière de fission.

4.2 Aspects numériques

Nous avons tout d'abord brisé la symétrie de réflexion de gauche-droite du code HTDA symétrique [41]. Pour ce faire nous avons inséré le code Hartree-Fock brisant de symétrie de parité développé par L. Bonneau [24] comme point de départ du code HTDA brisant la parité. Les forces de Skyrme SIII et SkM* ont été utilisées dans le canal particule-trou avec une force δ dans les canaux particule-particule et trou-trou pour traiter les corrélations d'appariement. Pour simplifier les calculs nous avons imposé la symétrie axiale. Pour construire une courbe d'énergie dépendant de la déformation octupolaire pour une valeur fixée du moment quadrupolaire, nous avons donc seulement introduit la partie de symétrie axiale de l'opérateur de contrainte sur le moment octupolaire $\hat{Q}_{30} \propto r^3 Y_{30}$ fournissant une mesure de l'asymétrie gauche-droite en y ajoutant une contrainte sur \hat{z} pour interdire le mouvement non-physique de déplacement du centre de masse. Pour résoudre les équations de Hartree-Fock nous avons décomposé les fonctions d'onde individuelles sur une base d'oscillateur harmonique axialement déformé [52] avec une taille de base fixée par le paramètre usuel $N_0 = 15$.

L'intensité de l'interaction résiduelle δ de l'approche HTDA est ajustée par comparaison de la somme S définie par (1.149) avec la quantité équivalente (1.91) qu'on obtiendrait dans un

calcul HF(SIII, SkM*)+BCS(G) utilisant les paramètres de la référence [77] pour l'intensité de l'élément de matrice constant de pairing. Cette somme S est calculée à une déformation fixée plus ou moins arbitrairement pour chaque noyau. Pour ^{194}Pb et $^{194}\text{PbSD}$ nous avons choisi l'état défini par les paramètres de la déformation $q_2 = 42.37\text{b}$ et $q_3 = 0\text{fm}^3$ où la valeur de q_2 correspond au moment quadupolaire de l'état superdéformé expérimental de ^{194}Pb [90, 91]. Pour ^{222}Ra , nous avons choisi l'état fondamental symétrique octupolaire ($q_2 = 13\text{b}$, $q_3 = 0\text{fm}^3$). Pour ^{240}Pu , des déformations correspondant au voisinage de la deuxième barrière de fission ($q_2 = 105, 130\text{b}$, $q_3 = 0\text{fm}^3$) ont été choisies. La valeur de X (cf. section 1.4.5) pour les calculs HTDA a été fixée à 6 MeV. La même valeur a été retenue pour le paramètre $\Delta\varepsilon$ de la méthode HF+BCS pour les neutrons et protons. Cette procédure permettant de paramétrer les intensités de la force δ a été effectuée séparément pour les deux forces de Skyrme utilisées SIII et SkM*. Ces paramètres sont présentés dans la Table 4.1.

SIII					SkM*			
HF + BCS		^{194}Pb	^{222}Ra	^{240}Pu		^{194}Pb	^{222}Ra	^{240}Pu
	$G_n(\text{MeV})$	16.361	14.438	14.448		15.672	13.496	13.530
	$G_p(\text{MeV})$	14.520	14.328	14.813		13.731	13.617	13.627
	$\Delta\varepsilon(\text{MeV})$	6	6	6		6	6	6
	$\mu(\text{MeV})$	0	0	0		0	0	0
HTDA	$\delta_n(\text{MeVfm}^3)$	663	329	278		732	306.8	255
	$\delta_p(\text{MeVfm}^3)$	313	302	365.2		306	373	317.2
	$X(\text{MeV})$	6	6	6		6	6	6
	$\mu(\text{MeV})$	0.2	0.2	0.2		0.2	0.2	0.2

TABLE 4.1 – Paramètres des interactions résiduelles pour les calculs HF+BCS et HTDA

4.3 Etat fondamental du noyau ^{194}Pb

4.3.1 Calculs HTDA non-projeté

Les courbes d'énergie de déformation octupolaire obtenues dans les calculs de HF+BCS et HTDA non projetés (courbes en trait plein) avec les deux forces utilisées (SIII et SkM*) sont présentées sur la Figure 4.1. Dans les deux cas, les résultats HTDA non projetés (cf. parties (c) et (d) de cette figure) confirment l'existence d'une déformation octupolaire rigide nulle pour l'état fondamental qui avait été obtenue en utilisant la méthode HF+BCS (cf. parties (a) et

(b)). En comparant pour les deux interactions la variation d'énergie de déformation en fonction de la déformation octupolaire on constate les faits suivants pour lesquels nous n'avons pas pour l'instant d'explication microscopique a priori :

+ L'état fondamental du noyau ^{194}Pb traité dans l'approche HF+BCS(G) est un peu plus rigide pour la déformation octupolaire avec l'interaction SIII qu'avec l'interaction SkM* ;

+ On conclut de même en ce qui concerne les résultats de l'approche HTDA sans projection ;

+ La rigidité de l'état fondamental de ^{194}Pb quand on utilise l'interaction SIII est plus grande pour les résultats HTDA sans projection que pour les résultats HF+BCS. Cette conclusion est inversée quand on utilise l'interaction SkM* ;

+ L'état fondamental du noyau ^{194}Pb obtenu avec les deux interactions de Skyrme SkM* et SIII est plus mou par rapport à la déformation octupolaire dans l'approche HF+BCS qu'avec l'approche HTDA.

+ Les courbes obtenues avec l'approche HTDA ne sont pas lisses, probablement parce que nous nous limitons à des calculs HTDA non auto-cohérents (une autre raison pourrait être liée à une trop faible efficacité du facteur d'adoucissement défini en (1.114)).

4.3.2 Calculs de projection

Pour chaque valeur considérée de q_3 nous avons projeté les états HTDA sur des états de bonne parité avec la méthode exposée au chapitre 3. Les résultats correspondant sont présentés dans les parties ((c) et (d)) de la Figure 4.1. La courbe de parité plus correspond toujours à une énergie plus basse et celle de parité moins à une énergie plus haute que la courbe d'énergie HTDA non projetée. Pour $q_3 = 0\text{fm}^3$ où les états individuels ont une bonne parité, les énergies des états HTDA et de parité plus sont égales alors que l'énergie de parité moins n'est pas définie dans le cadre de cette approche (indétermination 0/0). Le recouvrement $\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle$ en fonction de q_3 est présenté par la Figure 4.2. On constate que il diminue très rapidement quand q_3 augmente et est très semblable à une gaussienne.

A grand moment octupolaire, les trois courbes sont confondues. On considère le cas où la différence d'énergie entre les courbes de parité plus et de parité moins est inférieure à 10keV. Ceci correspond à une déformation octupolaire "critique" par exemple $q_3 \sim 2062\text{fm}^3$ pour la force de SkM* où le recouvrement $\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle$ est très petit (inférieur à 10^{-4}).

Les courbes des deux parités présentent des minima pour des moments octupolaires différents de zéro alors que dans des calculs HTDA non projetés on trouve que la solution avec $q_3 = 0\text{fm}^3$

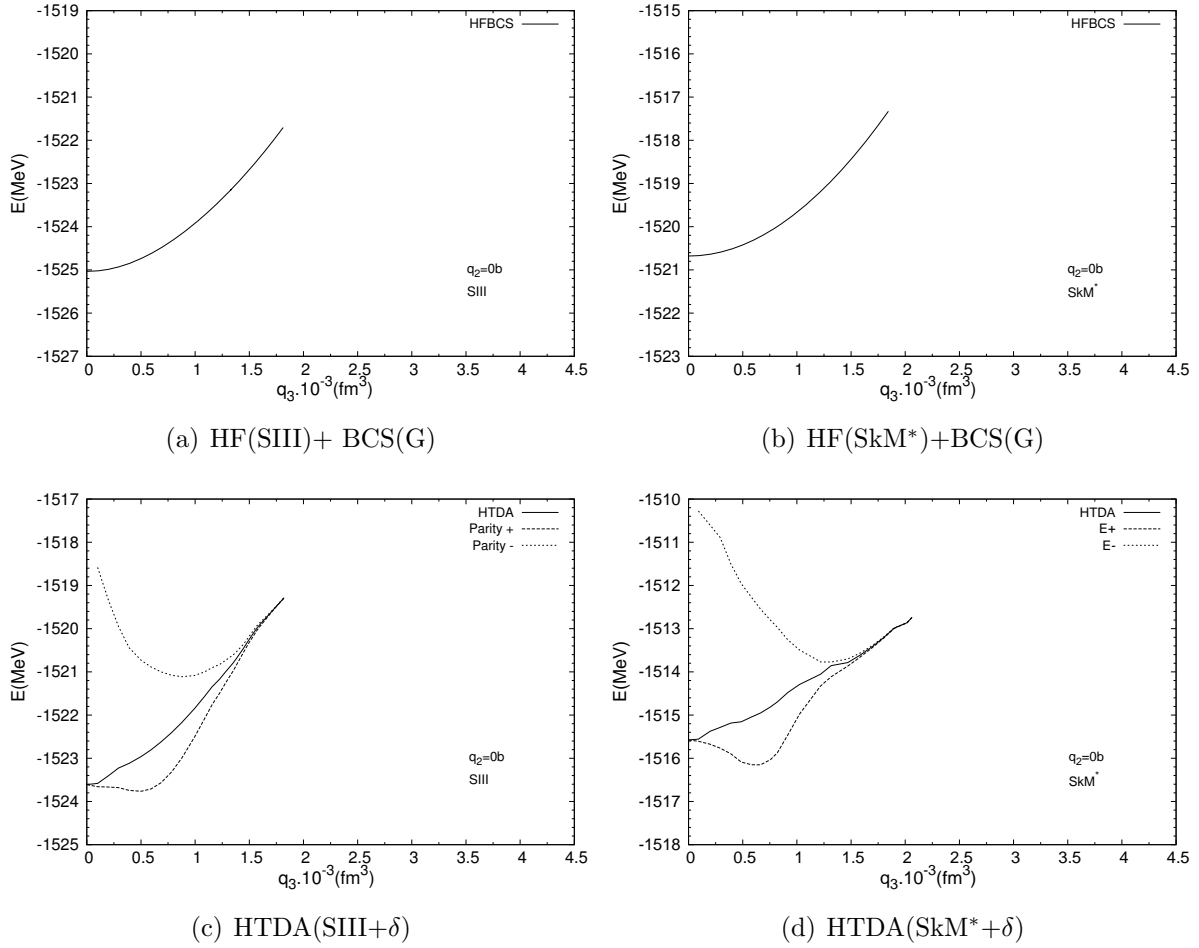
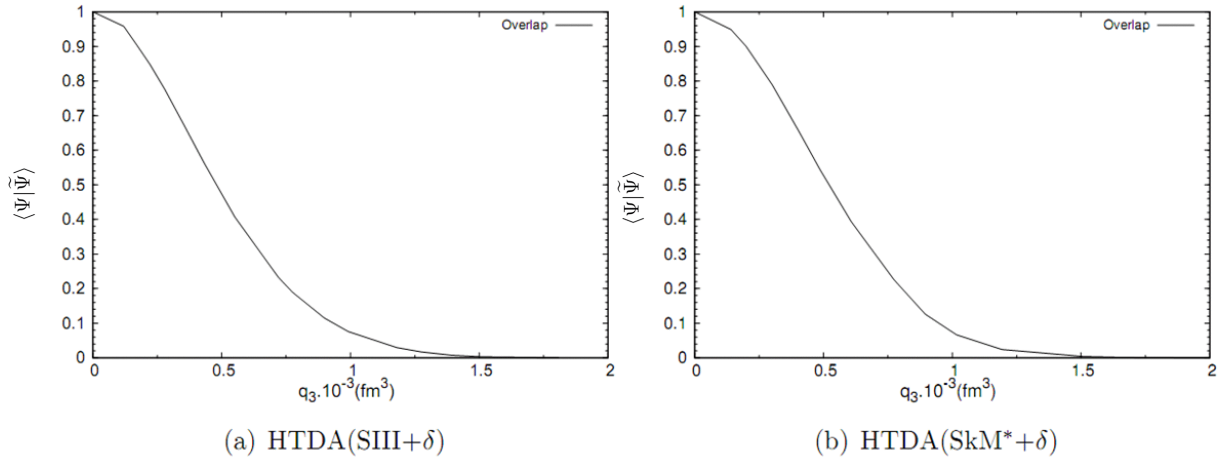


FIGURE 4.1 – Propriétés de déformation octupolaire de ^{194}Pb à l'état fondamental étudiées par la méthode HTDA(δ) avec les deux forces SIII (c) et SkM* (d). Les courbes en trait plein correspondent aux énergies (HF+BCS ou HTDA) en fonction du moment octupolaire q_3 . Les courbes en pointillés correspondent aux énergies projetées sur la parité moins et celles en tirets correspondent aux énergies projetées sur la parité plus.


 FIGURE 4.2 – Recouvrement $\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle$ pour l'état fondamental de ^{194}Pb .

est stable. On notera que le minimum de parité moins présente une plus grande déformation que celui de parité plus, à cause de la valeur plus élevée de son énergie à q_3 faible. Cette différence de forme à l'équilibre se traduit par des moments d'inertie différents pour les bandes de rotation construites sur de tels états intrinsèques. Cette propriété est en accord avec les données expérimentales où la bande de parité moins a souvent à bas spin un plus grand moment d'inertie que celui de la bande de parité plus. La différence de 2.29 MeV (pour SkM*) entre les énergies des minima des deux parités est comparable à l'énergie d'excitation à un phonon octupolaire dont l'ordre de grandeur correspond à l'énergie expérimentale du premier état de parité moins (état 5^-) soit 1.82 MeV [78]. Nous ne considérons cet accord qu'au niveau de l'ordre de grandeur dans la mesure où notre énergie de phonon correspond à un état intrinsèque.

Dans ce que suit il sera commode d'utiliser les notations détaillées dans la Figure 4.3.

+ E_{\pm}^m est la différence entre les énergies des minima des états des deux parités que l'on pourra, comme il est mentionné par ailleurs, rattacher à l'énergie intrinsèque d'excitation d'un phonon octupolaire.

+ E_-^m est la différence entre l'énergie du minimum de parité moins à la déformation octupolaire q_3^- par rapport à l'énergie de la solution (non-projetée) à $q_3 = 0$;

+ E_+^m est la différence entre l'énergie du minimum de parité plus à la déformation octupolaire q_3^+ par rapport à l'énergie de la solution non-projetée à $q_3 = 0$;

+ q_3^l est la valeur minimale de la déformation octupolaire où les trois courbes en énergie sont considérées comme étant confondues.

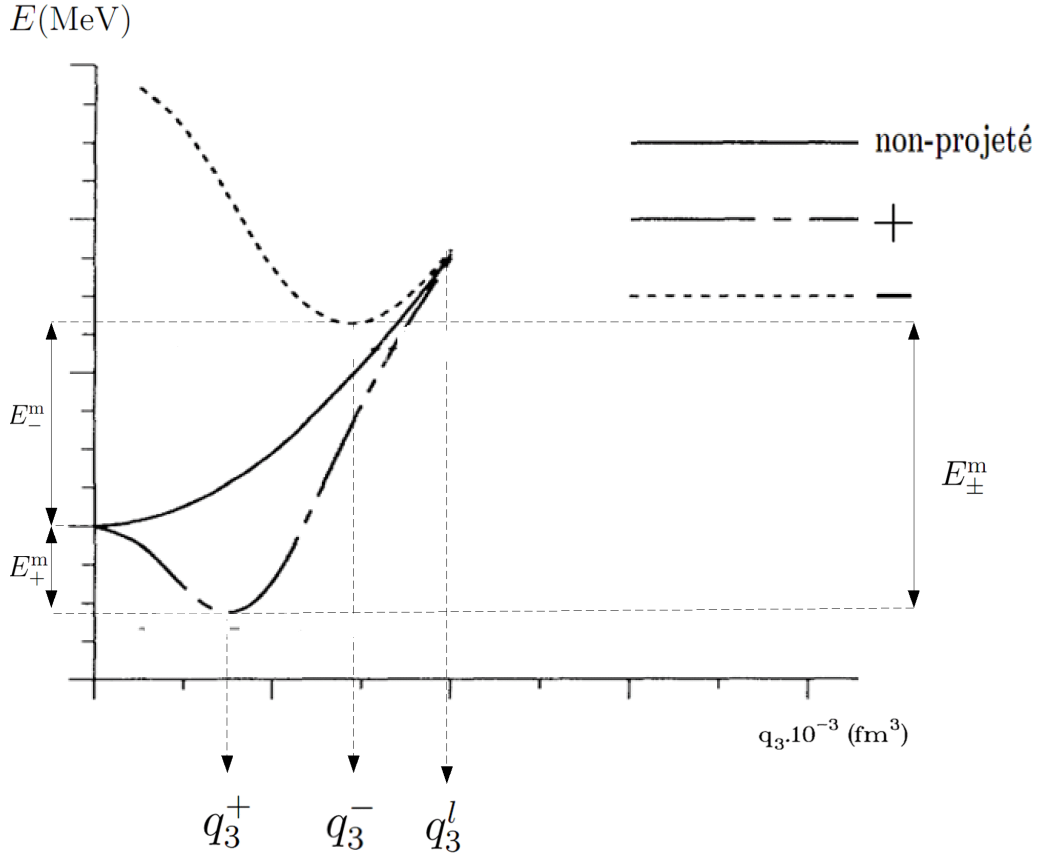


FIGURE 4.3 – Notations employées

Les différentes quantités tirées de ces courbes sont présentées par la table 4.2 en utilisant de telles notations. Ces résultats sont comparés avec ceux obtenus dans l'approche HF(SkM*)+BCS(G) effectuée P. Bonche *et al.*[76] (cf. Figure 4.4). Ces auteurs, par la projection sur la parité ont trouvé $E_{\pm}^m = 3.8$ MeV pour l'état fondamental et 2.1 MeV pour l'état superdéformé de ^{194}Pb . Quelques années plus tard, en mélangeant des états de déformation octupolaire différente par la méthode GCM, ils ont trouvé des valeurs de E_{\pm}^m très voisines soit 3.7 MeV pour l'état fondamental et 1.97 MeV pour l'état superdéformé. Donc, le mélange de configuration de type GCM traitant les vibrations octupolaires ne modifie pas significativement l'énergie d'excitation à un phonon octupolaire. Il en résulte que le résultat de E_{\pm}^m semble constituer une bonne approximation de cette énergie d'excitation.

4.3.3 Conclusions

Alors que les calculs sans projection indiquent une stabilité de la forme symétrique, la projection conduit à des déformations d'équilibre non symétriques (plus élevées pour l'état de parité moins que pour l'état de parité plus), et ce pour les deux interactions utilisées. En comparant les quantités présentées dans la table 4.2, on voit que la projection sur la parité de

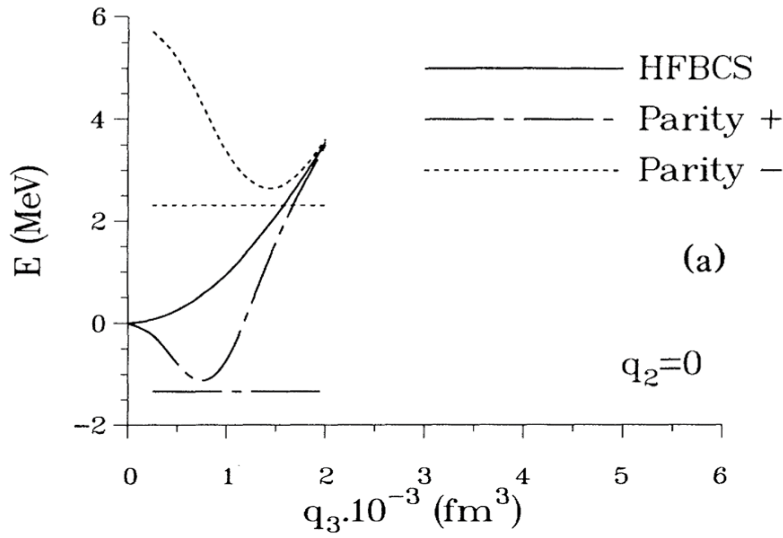


FIGURE 4.4 – Propriétés de déformation octupolaire de ^{194}Pb à l'état fondamental (a) (où $q_2 = 0$) étudiées par P. Bonche *et al.* avec la méthode HF(SkM*)+BCS(G), cf. référence [76]. La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HF+BCS en fonction du moment octupolaire q_3 . La courbe en longs tirets et points (tirets) est l'énergie projetée sur la parité plus (moins) à déformation octupolaire fixée.

l'approche HTDA donne une tendance très similaire à ce qui a été obtenu par P. Bonche *et al.* à l'approximation HF+BCS dans le cas de l'état fondamental de ^{194}Pb . Il est intéressant de noter que parmi les trois valeurs de l'énergie E_m^\pm , celle obtenue pour les calculs HTDA projetés avec l'interaction de SkM* est égale 2.2 MeV qui est la valeur plus proche de l'énergie expérimentale de l'état 5^- .

4.4 Etat superdéformé de ^{194}Pb ($^{194}\text{PbSD}$)

4.4.1 Calculs HTDA non-projeté

L'état superdéformé de ^{194}Pb a été le premier trouvé expérimentalement parmi les isotopes de Plomb [80, 81]. Les études microscopiques effectués par P. Bonche *et al.* [76], J. Meyer *et al.* [79] ont montré dans le cadre d'une approche HF+BCS suivie de calculs GCM pour la coordonnée génératrice $\langle Q_{30} \rangle$ et de la projection sur la parité que la déformation octupolaire joue un rôle plus important au minimum superdéformé qu'à l'état fondamental du ^{194}Pb . Le spectre des états individuels à la superdéformation (correspondant à un ellipsoïde axial allongé un rapport d'axes de 2 :1) favorise les excitations octupolaires. Les énergies de déformation octupolaire obtenue dans les calculs HF+BCS et HTDA non projetés (courbes en trait plein) avec les deux forces utilisées (SIII et SkM*) sont présentées sur la Figure 4.5. En comparant pour les deux interactions la variation d'énergie de déformation en fonction de la déformation octupolaire on constate que :

	HTDA(SIII+ δ)	HTDA(SkM*+ δ)	P. Bonche <i>et al.</i> [76]	Expérience
$q_3^+(\text{fm}^3)$	600	730	750	
$E_+^m(\text{MeV})$	0.2	0.59	1.05	
$q_3^-(\text{fm}^3)$	900	1300	1500	
$E_-^m(\text{MeV})$	2.6	1.8	2.75	
$q_3^l(\text{fm}^3)$	1821	2062	~ 2000	
$E_{\pm}^m(\text{MeV})$	2.8	2.39	3.8	1.82

TABLE 4.2 – Propriétés de déformation obtenues dans nos calculs comparées à celles de P. Bonche *et al.*[76] pour l'état fondamental de ^{194}Pb .

- + L'état $^{194}\text{PbSD}$ traité dans l'approche HF+BCS(G) est un peu plus rigide pour la déformation octupolaire avec l'interaction SIII qu'avec l'interaction SkM* ;
- + On conclut de même en ce qui concerne les résultats de l'approche HTDA sans projection ;
- + La rigidité de $^{194}\text{PbSD}$ obtenue pour les résultats HTDA sans projection est très similaire à celle obtenue pour les résultats HF+BCS et ce pour les deux forces de Skyrme.

4.4.2 Calculs de projection

Le Figure 4.5 présente les résultats de la projection sur la parité pour des solutions HTDA. Les différentes quantités tirées de ces courbes sont portées dans la table 4.3. On constate que la variation de l'énergie en fonction de q_3 y est moins rapide que pour l'état fondamental : l'état superdéformé est plus mou par rapport à q_3 que l'état fondamental. L'énergie E_+^m et la déformation q_3^+ sont plus grandes que celle obtenue à l'état fondamental avec la force SIII. Pour la force SkM*, la valeur de E_m^+ est de 0.61 MeV qui est un peu plus élevée que celle de l'état fondamental à une déformation beaucoup plus grande ($q_3^+ = 1200\text{fm}^3$). La projection sur la parité joue donc un rôle important pour décrire la surface d'énergie potentielle traitée par la méthode HTDA. La projection sur la parité positive favorise l'excitation du degré de liberté octupolaire comme on peut le voir sur la Figure 4.6 . Nous avons obtenu des résultats très similaires à ceux du travail de P. Bonche *et al.*[76].

4.5 Etat fondamental de ^{222}Ra

La forme non-symétrique de l'état fondamental de certains isotopes de Ra a été découverte pour la première fois par le groupe de Berkeley [82] en effectuant des études de spectroscopie alpha. Depuis, des bandes de parité moins à basse énergie des noyaux $^{220-228}\text{Ra}$ sont été observées [59]. Vogel [83] en utilisant un modèle en couches déformé (proposé dans les années 1950

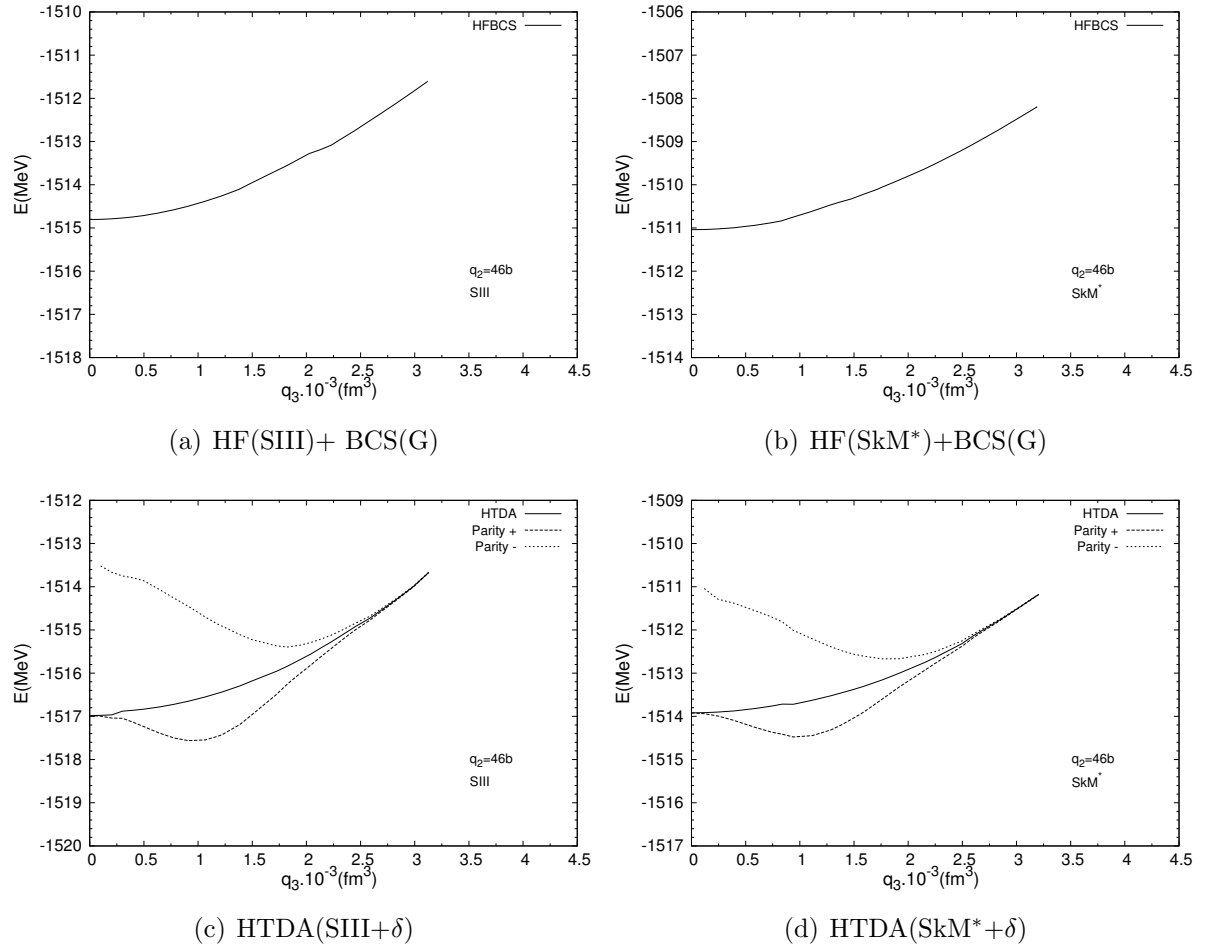


FIGURE 4.5 – Propriétés de déformation octupolaire de l'état superdéformé de ^{194}Pb étudiées par la méthode HTDA(δ) avec les forces Skyrme SIII (c) et SkM* (d). La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HTDA en fonction du moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie projetée sur la parité moins et en tirets sur la parité plus.

	HTDA(SIII+ δ)	HTDA(SkM*+ δ)	P. Bonche <i>et al.</i> [76]
q_3^+ (fm ³)	1000	1200	1250
E_+^m (MeV)	0.6	0.61	1.15
q_3^- (fm ³)	1900	2000	2500
E_-^m (MeV)	1.6	1.39	0.95
q_3^l (fm ³)	3120	3250	~ 3000
E_{\pm}^m (MeV)	2.2	2.0	2.1

TABLE 4.3 – Propriétés de déformation obtenues dans nos calculs comparées à celles de P. Bonche *et al.* [76] pour l'état superdéformé de ^{194}Pb

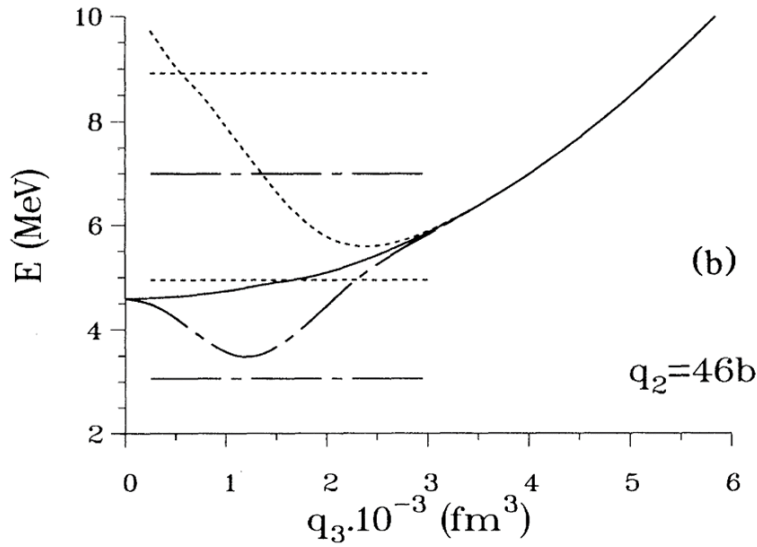


FIGURE 4.6 – Propriétés de déformation octupolaire de ^{194}Pb à l'état superdéformé ($q_2 = 46b$) étudiées avec la méthode HF(SkM*)+BCS(G) (Figure établie à partir de la référence [76]).

par Rainwater, Bohr, Moszkowski, Mottelson et Nilsson) dans la région $18 \leq A \leq 232$, a étudié tous les cas où se manifeste la déformation octupolaire. Avec un modèle macro-microscopique utilisant le potentiel de Woods-Saxon, Nazarewicz *et al.* [57] ont présenté une courbe d'énergie de déformation octupolaire de ces isotopes. Ils ont trouvé que le noyau ^{222}Ra est un des isotopes qui manifeste la déformation octupolaire la plus marquée parmi ces isotopes. Les premiers calculs auto-cohérents HF+BCS pour ce noyau ont été effectués avec la force de SIII par P. Bonche *et al.* [64]. Des calculs de même type ont été réalisés avec la force de Gogny par le groupe de Madrid [65] pour une série de noyaux ($^{222,224}\text{Ra}$, ^{222}Th et $^{142-148}\text{Ba}$). Dans le cas de ^{222}Ra ils ont trouvé un minimum d'énergie HF+BCS situé 1.5 MeV plus bas que l'énergie de l'état fondamental symétrique. La partie (a) de la Figure 4.7 montre que notre calcul HF(SIII)+BCS(G) conduit à un minimum correspondant à un gain d'énergie HF+BCS de 0.3 MeV. La partie (b) de la Figure 4.7 présente le même calcul HF+BCS(G) avec la force SkM*. Nous avons obtenu dans ce cas, un minimum correspondant à un gain d'énergie HF+BCS beaucoup plus élevé (2.2

MeV).

4.5.1 Calculs HTDA

Les énergies de déformation octupolaire obtenue dans les calculs de HF+BCS et HTDA non projetés (courbes en trait plein) avec deux forces utilisées (SIII et SkM*) sont présentés sur la Figure 4.7. Dans les deux cas, les résultats HTDA non projetés (parties (c) et (d) de cette figure) confirment l'existence d'un minimum pour l'état fondamental de ^{222}Ra comme cela a été obtenue en utilisant la méthode HF+BCS (parties (a) et (b) de la même figure). Ils la prédisent à peu près à la même déformation. En comparant pour les deux interactions la variation d'énergie déformé en fonction de la déformation octupolaire on constate les faits suivants :

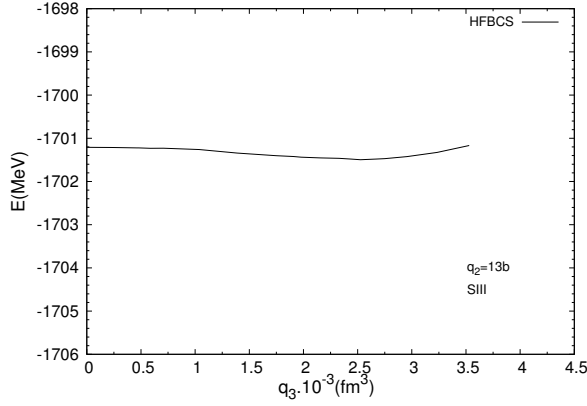
- + La rigidité pour la déformation octupolaire de l'état fondamental du noyau ^{222}Ra traités dans l'approche HF+BCS(G) et l'approche HTDA est plus marquée avec l'interaction SkM* qu'avec l'interaction SIII.

- + La rigidité de l'état fondamental du noyau ^{222}Ra est plus marquée (à la même déformation octupolaire d'équilibre) avec l'approche HTDA qu'avec celle de HF+BCS pour les deux forces utilisées.

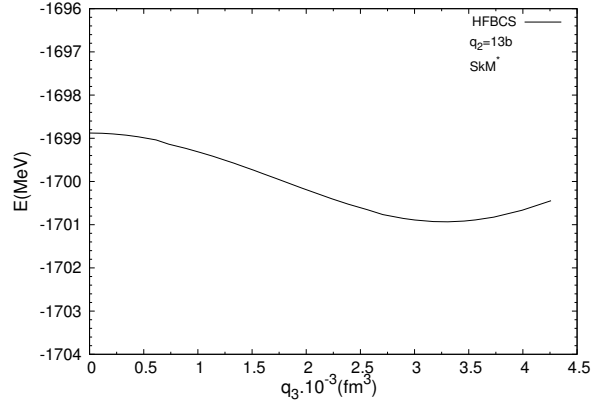
La Figure 4.7 présente les résultats de la projection sur la parité obtenus avec la méthode HTDA. On constate qu'après projection, le point d'équilibre ne bouge pas puisqu'il survient à une déformation octupolaire bien plus grande que q_3^l pour les deux forces utilisées. La projection n'a donc aucun effet sur les propriétés de ce noyau au voisinage de son point d'équilibre classique.

4.6 Seconde barrière de fission du ^{240}Pu

La déformation octupolaire est reconnue comme étant un degré de liberté très important dans la description des secondes barrières de fission des noyaux lourds. Des premiers calculs utilisant la méthode de Strutinsky [84] avec une forme de noyau supposé axiale et ayant une symétrie par réflexion droite-gauche, ont donné une hauteur de deuxième barrière (E_B) plus grande que celle de la première (E_A) ce qui est contradictoire avec l'expérience pour ^{240}Pu . Cette difficulté a été levée dans le travail de Möller et Nilsson [55] qui a montré que la seconde barrière de fission dans les actinides pouvait être abaissée lorsque le noyau est autorisé à explorer la déformation octupolaire. A la même époque, H. Flocard *et al.* [86] ont réalisé le premier calcul self-consistant de la barrière du ^{240}Pu l'aide de la force nucléon-nucléon de Skyrme SIII. En imposant la symétrie axiale et de réflexion droite-gauche, ce calcul a conduit à une courbe à deux bosses comme celle obtenue par la méthode de Strutinsky. En utilisant la force D1S avec l'approche de Hartree-Fock-Bogoliubov, J. F. Berger *et al.* [88] ont obtenu une valeur raisonnable $E_B = 7.5$ MeV pour la seconde barrière de fission du ^{240}Pu . Dans le même noyau, en utilisant



(a) HF(SIII)+BCS(G)



(b) HF(SkM*)+BCS(G)

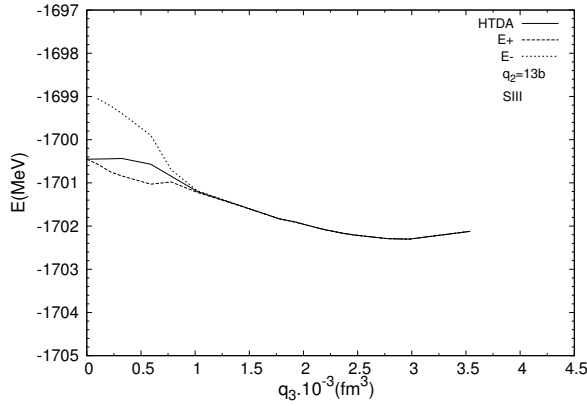
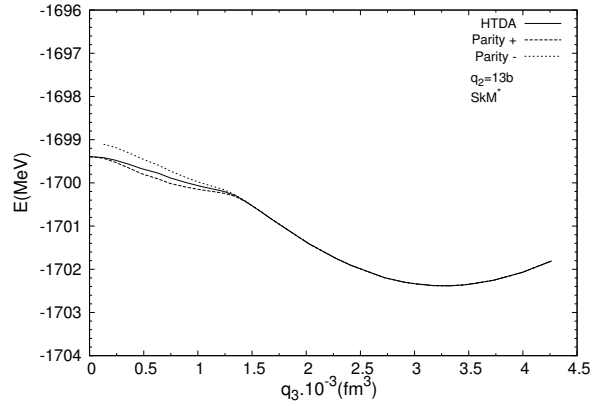

 (c) HTDA(SIII+ δ)

 (d) HTDA(SkM*+ δ)

FIGURE 4.7 – Propriétés de déformation octupolaire de ^{222}Ra à l'état fondamental étudiées par la méthode HTDA(δ) avec deux force de SIII (c) et de la force SkM* (d). La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HTDA en fonction de moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie de la solution projetée sur la parité moins et celle en tirets correspond à la parité plus.

l'approche HF+BCS brisant la symétrie axiale et la parité avec la force SkM* L. Bonneau *et al.*[89] ont montré que les valeurs théoriques de E_B reproduisent à moins de 1 MeV les valeurs expérimentales pour un très grand nombre de noyaux dans la région Th-U-Pu-Cm-Cf-Fm. Une étude [24] a été effectuée pour comparer la hauteur des barrières dans les approches HF+BCS et HTDA en imposant la symétrie axiale et la symétrie de réflexion droite-gauche. Elle a trouvé que la valeur de E_B pour HTDA est plus grande que celle de HF+BCS d'environ 1.5 MeV si on tient compte de la dépendance en déformation de l'appariement. Ceci nous a suggéré de revisiter les propriétés de la deuxième barrière de fission obtenues dans le cadre de l'approche HTDA et d'étudier les effets apportés par la projection sur la parité. A cause du temps limité restant pour compléter notre thèse, nous n'avons appliqué le code HTDA brisant la parité suivi de la projection sur la parité, que pour effectuer une étude préliminaire dans la région de la deuxième barrière de fission de ^{240}Pu . Nous avons seulement considéré deux points typiques à $q_2 = 105\text{b}$ et $q_2 = 130\text{b}$ qui se situent avant et après le sommet de la deuxième barrière de fission asymétrique (cf. Figure. 4.8).

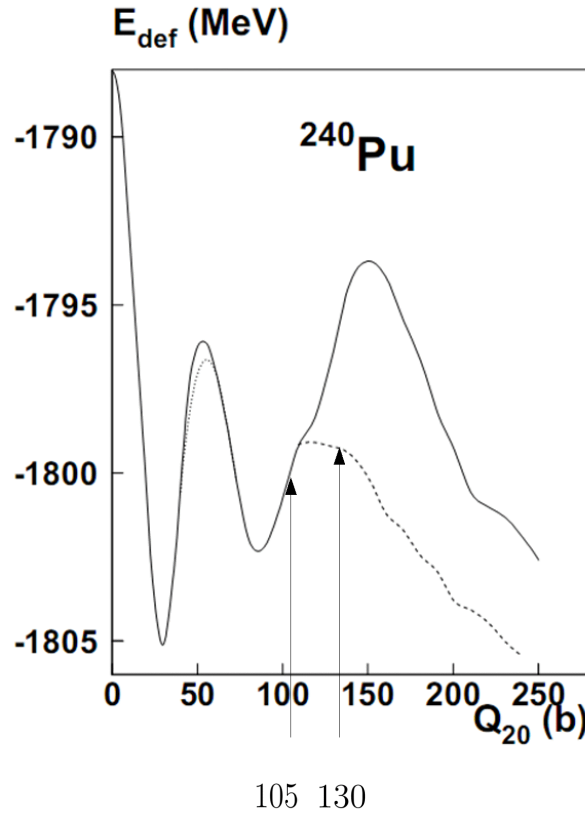


FIGURE 4.8 – Courbe d'énergie de déformation de ^{240}Pu dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G) tirée de la référence [89]. La courbe en pointillés correspond à un calcul triaxial (à la première barrière). L'effet de la déformation asymétrique (à la seconde barrière) est indiqué par la courbe en tirets. La courbe en trait plein correspond au calcul symétrique.

4.6.1 Calculs HTDA

Les énergies de déformation octupolaire obtenues dans les calculs de HF+BCS et HTDA non projetés (courbes en trait plein) avec les deux forces utilisées (SIII et SkM*) à $q_2 = 105b$ et $q_2 = 130b$ sont présentées sur les Figures 4.9 et 4.10. Pour les deux interactions, la variation de l'énergie en fonction de la déformation octupolaire obtenue dans l'approche HTDA non projetée est en général comparable à celle que fournit l'approche HF+BCS. Avant le sommet de barrière de fission ($q_2 = 105b$) la solution symétrique est encore stable par rapport à la déformation octupolaire. Elle devient instable après le sommet de cette barrière ($q_2 = 130b$). Les Figures 4.9 et 4.10 présentent les résultats de la projection sur la parité des résultats HTDA à $q_2 = 105b$ et $q_2 = 130b$. On voit que même à $q_2 = 105b$ la solution de parité positive devient asymétrique après projection sur la parité. L'instabilité de la solution HTDA symétrique est accentuée par la projection sur les états de parité plus dans les calculs effectués après le sommet ($q_2 = 130b$). Pour conclure quantitativement sur l'abaissement de la barrière dû à la projection il faudrait effectuer des calculs de façon plus systématique. On peut s'attendre néanmoins à une diminution (pour la barrière de parité positive) de l'ordre de 1 MeV.

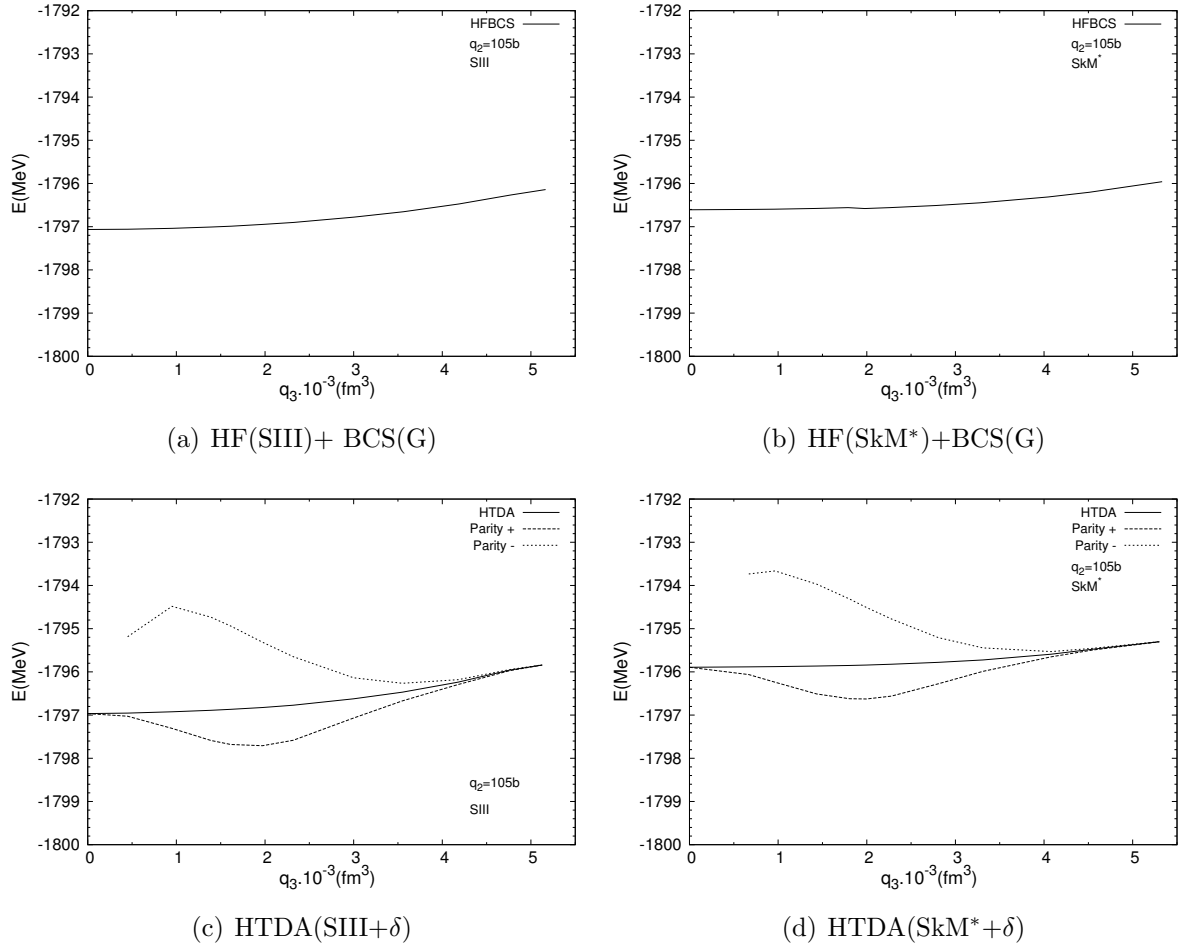


FIGURE 4.9 – Propriétés de la déformation octupolaire du ^{240}Pu à $q_2 = 105b$ étudiées par la méthode HTDA(δ) avec la force SIII (c) et la force SkM* (d). La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HTDA en fonction du moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie de la solution projetée sur la parité moins et celle en tirets correspond à la parité plus.

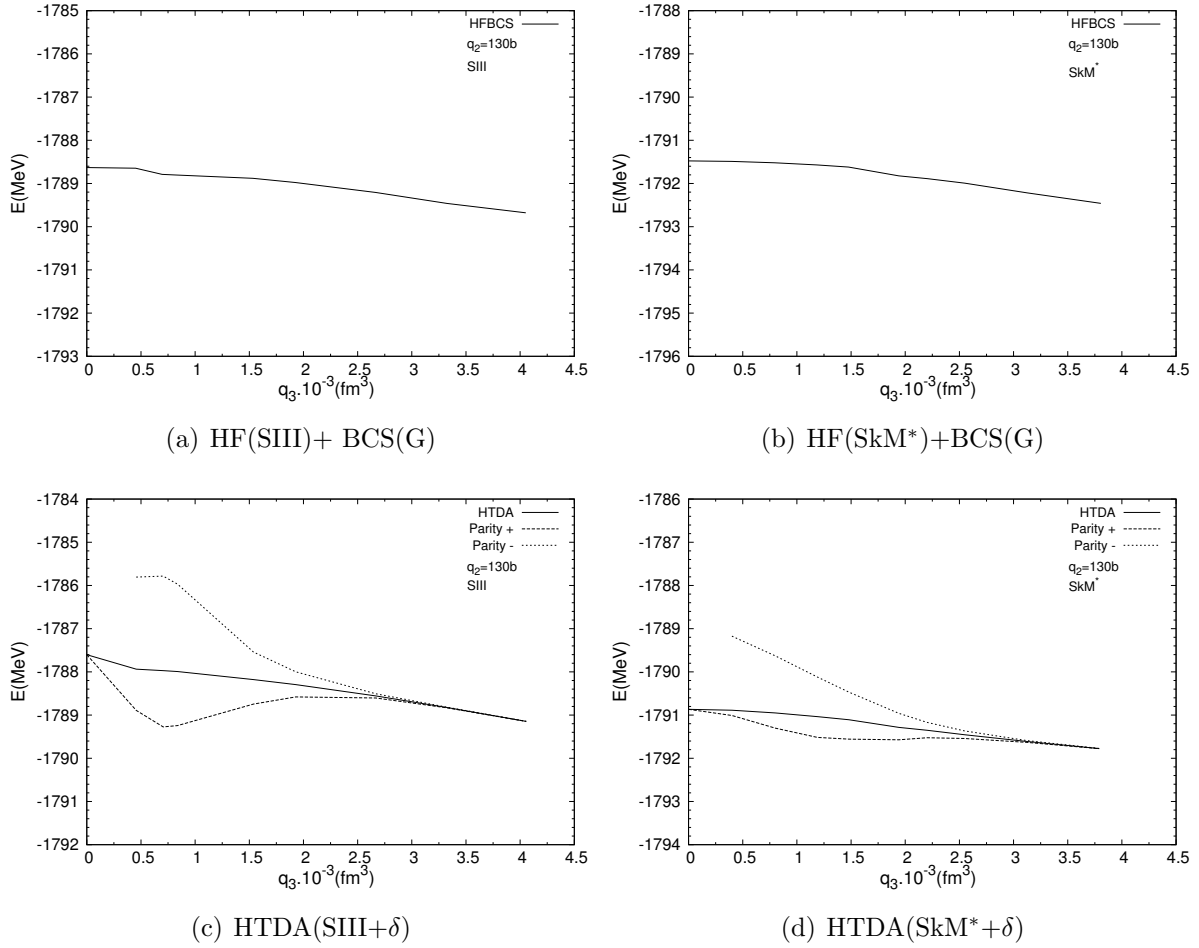


FIGURE 4.10 – Propriétés de la déformation octupolaire du ^{240}Pu à $q_2 = 130b$ étudiées par la méthode HTDA(δ) avec la force SIII (c) et la force SkM* (d). La courbe en trait plein correspondant à l'énergie de HTDA en fonction de moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie de la solution projetée sur la parité moins et en tirets correspondant à la parité plus.

Conclusions-Perspectives

Le premier travail effectué dans cette thèse a consisté à mettre en place le formalisme permettant de restaurer la symétrie de réflexion droite-gauche quand elle est brisée, dans le cadre de l'approche HTDA. Un formalisme possible est basé sur la méthode PAV (projection après variation) qui conduit à calculer les éléments de matrice entre deux fonctions d'ondes à N corps quelconques. Ces éléments de matrice ont été calculés en utilisant une généralisation du théorème de Wick donnée par R. Balian et E. Brezin [51] pour des vides de quasi-particules de Bogoliubov ou celui de type Löwdin [50] pour des déterminants de Slater. Dans toutes ces approches, on constate que ce théorème n'est valide que si le recouvrement entre les deux vides de fermions est différent de zéro. L'apparition d'un type d'éléments de matrice spécifique propre au cas du recouvrement nul nous demande de revenir à la méthode de mineurs plus fondamentale de Löwdin [49]. En profitant de la symétrie axiale imposée et des propriétés des déterminants nous avons étudié une manière commode de calculer ces éléments de matrice. En introduisant des bases bi-orthogonales nous avons mis en évidence une généralisation du théorème de Wick à partir de la méthode des mineurs qui est, compte tenu de notre problème dans le contexte HTDA, plus simple que celle qu'on pourrait déduire du travail de R. Balian et E. Brezin [51]. Il est important de noter que les résultats obtenus sont présentés sous une forme cohérente avec la méthode du vide relatif utilisée fréquemment dans le formalisme de la méthode HTDA [4]. Cette méthode fournit donc une base pour calculer les différents éléments de matrice entre des états à N corps dans d'autres situations plus compliquées de mélange de configurations comme c'est le cas pour la restauration de la symétrie de rotation par exemple. Elle permet aussi de définir un champ moyen mixte qui joue un rôle important pour la définition de l'interaction résiduelle dans le Hamiltonien du système.

La densité mixte, s'avère être un bon outil pour restaurer les symétries par la méthode de projection. Malheureusement elle brise aussi cette symétrie dans les cas étudiés. Cette caractéristique combinée avec la dépendance de la force Skyrme en densité (exprimée dans le repère intrinsèque et donc également asymétrique) conduit à un Hamiltonien brisant la symétrie qu'on veut précisément restaurer (problème que cette approche HTDA n'est pas la seule à rencontrer puisque l'interaction de Skyrme dépend de la densité)! De plus une difficulté supplémentaire vient de l'approximation de Slater pour le terme d'échange de Coulomb utilisant une densité mixte conduisant à des calculs insatisfaisants (elle n'est en effet pas toujours non négative). C'est pourquoi nous avons proposé un modèle simplifié. Il consiste à remplacer la densité mixte par la densité intrinsèque dans la définition du champ moyen qui devrait faire intervenir la densité mixte si on voulait être cohérent avec la définition de l'interaction résiduelle. Cette approximation a permis de simplifier de façon considérable les calculs, tout en supprimant les difficultés pratiques évoquées plus haut. En outre, en dehors de très faibles

contributions à l'énergie il ne fait intervenir que des éléments de matrice impliquant la partie symétrique par parité du Hamiltonien.

Pour remplir ce programme, nous avons du tout d'abord inséré le code Hartree-Fock brisant la parité dans le code HTDA existant pour le rendre capable de décrire les solutions microscopiques ayant une déformation octupolaire. Nous avons effectué de nombreux tests numériques pour vérifier le code HTDA brisant la parité. Nous avons ensuite développé un formalisme approché permettant d'effectuer la projection sur la parité en évaluant analytiquement les divers éléments de matrice impliqués puis en développant un code numérique pour les calculer.

Cette approche a été utilisée pour étudier l'état fondamental de ^{194}Pb , l'état superdéformé de ce même noyau, l'état fondamental du ^{222}Ra avec les deux paramétrisations de la force de Skyrme SIII et SkM*. Pour l'état fondamental de ^{194}Pb et son état superdéformé, les calculs sans projection indiquent une stabilité de la forme symétrique alors que la projection conduit à des déformations d'équilibre non symétriques. La projection sur la parité positive favorise toujours l'excitation du degré de liberté octupolaire ce qui illustre le rôle capital de la projection sur la parité pour décrire dans ce cas (tout à fait général pour des noyaux pair-pairs) la surface d'énergie potentielle traitée par la méthode HTDA. Pour l'état fondamental du ^{222}Ra la projection n'a aucun effet sur les propriétés au voisinage de son point d'équilibre classique puisque ce dernier survient à une déformation octupolaire bien plus grande que la déformation critique où la projection n'opère plus de changement dans les énergies. Ces résultats ont été obtenus de façon en gros similaire pour les deux forces de Skyrme utilisées et sont qualitativement comparables avec ceux de calculs antérieurs de type HF+BCS ou HFB. Forts de ces résultats encourageants, nous avons poursuivi notre étude avec le noyau ^{240}Pu au voisinage de la seconde barrière de fission. La projection sur la parité rend la solution symétrique de parité positive instable pour la déformation octupolaire avant la déformation quadrupolaire obtenue sans projection pour la seconde barrière de fission.

Cette thèse se donnait pour objectif majeur de montrer qu'au prix de certaines approximations sur l'interaction résiduelle (où on a remplacé l'interaction à 2 corps de Skyrme par une interaction delta) et sur le champ moyen, on pouvait obtenir une description raisonnable des propriétés de déformation octupolaire pour des solutions projetées sur la parité. C'est à cette fin que nous avons comparé nos résultats avec ceux obtenus dans les travaux de P. Bonche et al [76]. Il reste maintenant à effectuer au delà de ces calculs de principe, de vraies études spectroscopiques soit en étendant les études dans les régions considérées ici, soit en considérant d'autres régions concernées par le mode octupolaire (région du Baryum par exemple). En outre, ce travail semble offrir des perspectives intéressantes. Tout d'abord il conduit à réévaluer la hauteur de la deuxième barrière de fission pour des noyaux lourds. D'un point de vue plus technique maintenant, l'espace de configuration des états à plusieurs corps devra être élargi pour traiter

l'interaction résiduelle neutron-proton. Des excitations d'ordre supérieur comme celles incluant des diffusions de deux paires, trois paires ...devront être prises en compte. On notera enfin que ce formalisme fournit une base pour mélanger des configurations correspondant à des valeurs différentes de q_3 par la méthode de la coordonnée génératrice pour traiter les états excités nucléaires correspondant à ce type de mode collectif.

Base de l'oscillateur harmonique à symétrie axiale (B.O.H.S.A.)

A.1 Définition

Pour décomposer les états individuels Hartree-Fock nous utilisons la base des états propres de l'oscillateur harmonique déformé à symétrie axiale. Elle est la base des états propres simultanés :

+ du hamiltonien :

$$h = \sum_{i=1}^3 h_i = \sum_{i=1}^3 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_i^2 + \frac{1}{2} m \omega_i^2 x_i^2 \right] \quad (\text{A.1})$$

(avec 1, 2, 3 correspondant à x, y, z ; $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ et $\omega_1 = \omega_2 = \omega_\perp$)

+ de la projection L_z du moment orbital sur l'axe O_z

$$L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) = -i\hbar\partial_\varphi \quad (\text{A.2})$$

(où φ est la coordonnée angulaire en coordonnées cylindriques)

+ de la projection S_z du spin sur l'axe O_z .

Un état de la base B.O.H.S.A. peut être défini par les nombres quantiques n_z (nombre de quanta sur Oz), n_\perp (nombre de quanta sur Ox et Oy), Λ (nombre quantique correspondant à l'opérateur L_z), et Σ (nombre quantique correspondant à l'opérateur S_z) :

$$|n_z, n_r, \Lambda, \Sigma\rangle \quad (\text{A.3})$$

En introduisant les opérateurs a_i^\dagger, b_i^\dagger qui sont des opérateurs de création bosonique obtenus par rotation dans l'espace des opérateurs a_x^\dagger, a_y^\dagger [93], cet état pourra être également défini avec les nombres quantiques n_z, α, β et Σ :

$$|n_z, n_r, \Lambda, \Sigma\rangle \equiv |n_z, \alpha, \beta, \Sigma\rangle = (-1)^\beta \frac{(a_z^\dagger)^{n_z}}{\sqrt{n_z!}} \frac{(b_\alpha^\dagger)^\alpha}{\sqrt{\alpha!}} \frac{(b_\beta^\dagger)^\beta}{\sqrt{\beta!}} |000\rangle |\Sigma\rangle \quad (\text{A.4})$$

où

$$\alpha = \frac{n_{\perp} + \Lambda}{2}, \beta = \frac{n_{\perp} - \Lambda}{2} \quad (\text{A.5})$$

On peut écrire sa fonction d'onde en représentation de position et de spin [8]

$$\varphi_{\alpha}(\mathbf{r}, \sigma) = \chi_{\sigma} \psi_{n_z}(z) \psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{A.6})$$

où χ_{σ} est un spineur à deux composantes défini par :

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

On notera que cette écriture $\varphi_{\alpha}(\mathbf{r}, \sigma)$ est quelque peu redondante car pour un état $|\alpha\rangle$ donné on n'a qu'une seule valeur de σ à considérer.

La fonction radiale normée $\psi_{n_r}^{\Lambda}(r)$ est choisie de sorte que $\phi_{n_r}^{\Lambda}(r, \varphi) = \psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ soit fonction propre de l'oscillateur harmonique radial :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_{n_r}^{\Lambda}(r, \varphi) + \frac{1}{2} m \omega_{\perp}^2 r^2 \phi_{n_r}^{\Lambda}(r, \varphi) = E_{n_r}^{\Lambda} \phi_{n_r}^{\Lambda}(r, \varphi) \quad (\text{A.8})$$

avec $E_{n_r}^{\Lambda} = \hbar \omega_{\perp} (n_{\perp} + 1)$, $n_{\perp} = 2n_r + |\Lambda|$, $n_r \in \mathbb{N}$ et $\Lambda \in \mathbb{Z}$. La fonction $\psi_{n_r}^{\Lambda}$ s'écrit alors :

$$\psi_{n_r}^{\Lambda}(r) = \sqrt{\frac{(n_{\perp} - |\Lambda|)/2!}{(n_{\perp} + |\Lambda|)/2!}} (-)^{(\Lambda - |\Lambda|)/2} \sqrt{2} \beta_{\perp} e^{-\eta/2} \eta^{\Lambda/2} L_{n_r}^{|\Lambda|}(\eta) \quad (\text{A.9})$$

où l'on a posé $\beta_{\perp} = \sqrt{m \omega_{\perp} / \hbar}$ et $\eta = \beta_{\perp}^2 r^2$. La fonction L_n^{α} est le polynôme usuel de Laguerre modifié de degré n . Cette famille de polynômes orthogonaux est associée à la fonction de poids $e^{-\eta} \eta^{\alpha}$ sur intervalle $[0, +\infty[$.

Quant à la fonction normée $\psi_{n_z}(z)$, elle est fonction propre de l'oscillateur harmonique à une dimension suivant la direction z :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{n_z}(z) + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \psi_{n_z}(z) = E_{n_z} \psi_{n_z}(z) \quad (\text{A.10})$$

avec $E_{n_z} = \hbar \omega_z (n_z + 1)$, $n_z \in \mathbb{N}$. La fonction $\psi_{n_z}(z)$ s'écrit alors :

$$\psi_{n_z}(z) = (\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!)^{-1/2} \sqrt{\beta_z} H_{n_z}(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (\text{A.11})$$

où l'on a posé $\beta_z = \sqrt{m \omega_z} / \hbar$ et $\xi = \beta_z z$. La fonction H_{n_z} est le polynôme usuel d'Hermite de degré n_z . Cette famille de polynômes orthogonaux est associée à la fonction de poids $e^{-\xi^2}$ sur l'intervalle $]-\infty, +\infty[$.

Cette base est infinie mais dénombrable. Dans un calcul pratique il faut tronquer cette base. La prescription de la troncation de la base proposée dans la référence [92], consiste à inclure tous les états dont l'énergie d'oscillateur est inférieure à une certaine valeur :

$$\hbar\omega_{\perp}(n_{\perp} + 1) + \hbar\omega_z(n_z + \frac{1}{2}) \leq \hbar\omega_0(N_0 + 2) \quad (\text{A.12})$$

où $\omega_0 = (\omega_z\omega_{\perp}^2)^{1/3}$ et où N_0 est le nombre de couches sphériques incluses dans la base à la sphéricité ($\omega_{\perp} = \omega_z = \omega_0$).

A.2 Etats individuels Hartree-Fock

Un état individuel $|\phi_k\rangle$ de nombre quantique Ω_k se décompose sur un état $|\alpha\rangle = |n_z, n_r, \Lambda, \Sigma\rangle$ de cette base :

$$|\phi_k\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(k)} |\alpha\rangle \quad (\text{A.13})$$

où $C_{\alpha}^{(k)}$ est la coefficient de décomposition de l'état $|\phi_k\rangle$ sur cette base. Dans la représentation de position et de spin

$$\phi_k(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(k)} \langle \mathbf{r}, \sigma | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(k)} \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}, \sigma) \quad (\text{A.14})$$

En utilisant la formule (A.6) on obtient :

$$\phi_k(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(k)} \psi_{n_z}(z) \psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\sigma} \quad (\text{A.15})$$

L'état $|\psi_l\rangle$ défini par $|\psi_l\rangle = \hat{\pi}|\phi_l\rangle$ où $\hat{\pi}$ opérateur de parité peut être décomposé sur la même base $|\alpha'\rangle$:

$$|\psi_l\rangle = \sum_{\alpha'} C_{\alpha'}^{(l)} (-)^{n'_z + \Lambda'} |\alpha'\rangle \quad (\text{A.16})$$

où on a noté que tout état $|\alpha'\rangle$ est vecteur propre de $\hat{\pi}$ avec la valeur propre $(-)^{n'_z + \Lambda'}$ (cf. annexe B). Donc on obtient :

$$\psi_l(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{\alpha'} C_{\alpha'}^{(l)} (-)^{n'_z + \Lambda'} \psi_{n'_z}(z) \psi_{n'_r}^{\Lambda'}(r) \frac{e^{i\Lambda'\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\sigma'} \quad (\text{A.17})$$

ANNEXE B

Opérateur de parité

B.1 Définition

La parité est une symétrie discrète fondamentale. Mathématiquement elle est définie comme la réflexion par rapport à l'origine O du système de coordonnées. Supposons un système physique dont l'espace des états est $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$, l'opérateur parité $\hat{\Pi}$ est défini par :

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\Pi} | \psi \rangle = \psi(-\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad (\text{B.1})$$

où $|\psi\rangle$ est un vecteur quelconque de $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$. On peut donc écrire équivalamment que

$$\hat{\Pi} | \mathbf{r} \rangle = | -\mathbf{r} \rangle \quad (\text{B.2})$$

B.2 Propriétés de l'opérateur parité

+ $\hat{\Pi}$ est hermitique en effet :

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{\Pi} | \varphi \rangle &= \int d^3r \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{\Pi} | \varphi \rangle \\ &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \varphi(-\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

et

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{\Pi} | \psi \rangle^* &= \int d^3r (\langle \varphi | \hat{\Pi} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle)^* \\ &= \int d^3r (\varphi^*(-\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}))^* \\ &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \varphi(-\mathbf{r}) = \langle \psi | \hat{\Pi} | \varphi \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

on peut donc écrire :

$$\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger \quad (\text{B.5})$$

+ Il résulte de ce qui précède que

$$\hat{\Pi} \hat{\mathbf{r}} \hat{\Pi} = -\hat{\mathbf{r}} \quad (\text{B.6})$$

Son action sur deux autres opérateurs fondamentaux (impulsion \mathbf{p} et spin \mathbf{s}) est :

$$\hat{\Pi}\hat{\mathbf{p}}\hat{\Pi} = -\hat{\mathbf{p}} \quad (\text{B.7})$$

d'après les définitions de $\hat{\mathbf{p}}$ et de $\hat{\Pi}$ (équation (B.1)) et

$$\hat{\Pi}\hat{\mathbf{s}}\hat{\Pi} = \hat{\mathbf{s}} \quad (\text{B.8})$$

car $\hat{\Pi}$ n'agit que sur les variables d'espace.

+ L'opérateur $\hat{\Pi}^2$ est l'opérateur identité. En effet :

$$\hat{\Pi}^2|\mathbf{r}\rangle = \hat{\Pi}(\hat{\Pi}|\mathbf{r}\rangle) = \hat{\Pi}|-\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle \quad (\text{B.9})$$

c'est-à-dire, puisque les kets $|\mathbf{r}\rangle$ forment une base de $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$:

$$\hat{\Pi}^2 = \mathbf{1} \quad (\text{B.10})$$

ou encore :

$$\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^{-1} \quad (\text{B.11})$$

il découle de (B.5) et (B.11) que :

$$\hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}^+ \quad (\text{B.12})$$

$\hat{\Pi}$ donc est unitaire.

+ L'opérateur $\hat{\Pi}$ étant unitaire et hermitique est une involution.

+ $\hat{\Pi}$ est un opérateur de produit à N corps dans le sous-espace à N particules de l'espace de Fock, c'est-à-dire qu'il est le produit des opérateurs à 1 corps $\hat{\pi}$ dans le sous espace à 1 corps de l'espace de Fock

$$\hat{\Pi}(|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_N\rangle) = (\hat{\pi}|\phi_1\rangle) \otimes (\hat{\pi}|\phi_2\rangle) \otimes \dots \otimes (\hat{\pi}|\phi_N\rangle) \quad (\text{B.13})$$

+ L'action de l'opérateur parité s'exprime en coordonnées cylindriques par

$$\hat{\Pi} : \begin{cases} z \rightarrow -z \\ r \rightarrow r \\ \theta \rightarrow \pi + \theta \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

donc

$$\hat{\pi}\phi_i(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{\alpha} \delta_{\sigma, \sigma(\alpha)} (-)^{n_z + \Lambda} C_{\alpha}^{(i)} \psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \psi_{n_z}(z) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2}} \chi_{\sigma} \quad (\text{B.15})$$

puisque :

$$\hat{\pi}(\psi_{n_r}^{\Lambda}(r)) = \psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \quad (\text{B.16})$$

$$\hat{\pi}(\psi_{n_z}(z)) = (-)^{n_z} \psi_{n_z}(z) \quad \text{d'où} \quad \hat{\pi}(H_{n_z}(\xi)) = (-)^{n_z} H_{n_z}(\xi) \quad (\text{B.17})$$

$$\hat{\pi}(e^{i\Lambda\varphi}) = (-)^{\Lambda} e^{i\Lambda\varphi} \quad (\text{B.18})$$

+ L'état $|n_z, n_r, \Lambda, \Sigma\rangle$ de la B.O.H.S.A. est état propre de l'opérateur de parité avec la valeur propre $(-)^{n_z+\Lambda}$

$$\hat{\Pi}|n_z, n_r, \Lambda, \Sigma\rangle = (-)^{n_z+\Lambda}|n_z, n_r, \Lambda, \Sigma\rangle \quad (\text{B.19})$$

+ L'opérateur de parité $\hat{\Pi}$ commute avec l'opérateur de renversement du sens du temps \hat{T} . Soit un état quelconque de la B.O.H.S.A. par exemple. En utilisant la formule (B.19) on a :

$$\begin{aligned} \hat{T}\hat{\Pi}|n_z, n_{\perp}, \Lambda, \Sigma\rangle &= \hat{T}(-)^{n_z+\Lambda}|n_z, n_{\perp}, \Lambda, \Sigma\rangle \\ &= (-)^{n_z+\Lambda+\Omega+\frac{1}{2}}|n_z, n_{\perp}, -\Lambda, -\Sigma\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

et

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}\hat{T}|n_z, n_{\perp}, \Lambda, \Sigma\rangle &= \hat{\Pi}(-)^{\Omega+\frac{1}{2}}|n_z, n_{\perp}, -\Lambda, -\Sigma\rangle \\ &= (-)^{n_z-\Lambda+\Omega+\frac{1}{2}}|n_z, n_{\perp}, -\Lambda, -\Sigma\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Il en résulte donc que

$$[\hat{\Pi}, \hat{T}] = 0 \quad (\text{B.22})$$

+ L'opérateur quadrupolaire axial \hat{Q}_{20} ne faisant intervenir que des puissances paires des composantes de $\hat{\mathbf{r}}$, commute avec $\hat{\Pi}$,

$$\hat{\Pi}\hat{Q}_{20}\hat{\Pi} = \hat{Q}_{20} \quad (\text{B.23})$$

+ L'opérateur \hat{Q}_{30} ne faisant intervenir que des puissances impaires des composantes de $\hat{\mathbf{r}}$, anticommute avec $\hat{\Pi}$

$$\hat{\Pi}\hat{Q}_{30}\hat{\Pi} = -\hat{Q}_{30} \quad (\text{B.24})$$

Opérateur de renversement du sens du temps

C.1 Définition

L'opérateur de renversement du sens du temps, noté \hat{T} transforme de la façon suivante la position $\hat{\mathbf{r}}$, l'impulsion $\hat{\mathbf{p}}$ et le spin $\hat{\mathbf{s}}$ d'une particule

$$\hat{T}\hat{\mathbf{r}}\hat{T}^\dagger = \hat{\mathbf{r}} \quad (\text{C.1})$$

$$\hat{T}\hat{\mathbf{p}}\hat{T}^\dagger = -\hat{\mathbf{p}} \quad (\text{C.2})$$

$$\hat{T}\hat{\mathbf{s}}\hat{T}^\dagger = -\hat{\mathbf{s}} \quad (\text{C.3})$$

On voit entre autres conséquences que la transformation associée à cet opérateur change le signe des relations de commutation entre une composante de l'opérateur position et celle canoniquement conjuguée de l'opérateur impulsion. On peut montrer que les propriétés ci-dessus sont réalisées pour un opérateur \hat{T} agissant sur l'espace physique d'une particule défini par

$$\hat{T} = e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar} \hat{K}_0 \quad (\text{C.4})$$

où \hat{K}_0 est l'opérateur de conjugaison complexe associé à la représentation $\{\mathbf{r}, \sigma\}$ soit

$$\langle \mathbf{r}, \sigma | \hat{K}_0 | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} \sigma | \psi \rangle^* \quad (\text{C.5})$$

Cet opérateur est antiunitaire c'est-à-dire antilinéaire et tel que $\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1}$.

Dans l'espace des états physiques de N particules de spin demi entier on montre que

$$\hat{T}^2 = (-1)^N \quad (\text{C.6})$$

Il en résulte que pour un état à nombre pair de fermions

$$\hat{T}^2 = 1 \quad (\text{C.7})$$

C.2 Configurations paires par renversement du sens du temps

L'opérateur \hat{T} agissant sur un état produit $|\Psi\rangle$ est, de par sa structure, tel que

$$\hat{T}|\Psi\rangle = \prod_i (\hat{T}|i\rangle) \quad (\text{C.8})$$

Grâce à la symétrie axiale, nous pouvons partitionner l'espace des états à un corps en des états $|i\rangle$ qu'on appellera états positifs tels que $\langle i|\hat{j}_z|i\rangle > 0$ et en des états du sous-espace complémentaire qu'on appellera états négatifs de telle sorte que $\forall i > 0$, les états $|\bar{i}\rangle$ appartiennent au sous-espace des états négatifs. On va démontrer que le vide $|\Phi_0\rangle \equiv |0p0h\rangle$ et les configurations de diffusion d'une paire $|\Phi_2\rangle$ sont invariantes par renversement du sens du temps. En effet, on définit le quasi-vide pour un noyau pair-pair par $|\Phi_0\rangle = \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger |0\rangle$. Pour un état à 1 particule

$$\hat{T}|\bar{i}\rangle = -|i\rangle \quad (\text{C.9})$$

puisque dans ce cas $\hat{T}^2 = -1$. Il en résulte que

$$\hat{T}(|i\rangle|\bar{i}\rangle) = \hat{T}|i\rangle\hat{T}|\bar{i}\rangle = -|\bar{i}\rangle|i\rangle \quad (\text{C.10})$$

On en déduit que

$$\hat{T}(a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) = -a_{\bar{i}}^\dagger a_i^\dagger \quad (\text{C.11})$$

et à cause de l'antisymétrisation du déterminant de Slater

$$\hat{T}|\Phi_0\rangle = \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \hat{T}(a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) = \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_{\bar{i}}^\dagger a_i^\dagger = |\Phi_0\rangle \quad (\text{C.12})$$

Donc $|\Phi_0\rangle$ est un état pair par renversement du sens du temps. L'état $|\Phi_2\rangle$ de diffusion d'une paire peut s'écrire en général sous la forme $a_{k'}^\dagger a_{\bar{k}'}^\dagger a_k a_{\bar{k}} |\Phi_0\rangle$. On aura compte tenu de ce qui précède

$$\hat{T}|\Phi_2\rangle = a_{k'}^\dagger a_{\bar{k}'}^\dagger a_k a_{\bar{k}} |\Phi_0\rangle = |\Phi_2\rangle \quad (\text{C.13})$$

C.3 Simplification apportée par le caractère pair par rapport au renversement du sens du temps de nos solutions

Considérons deux configurations notées $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle$ qui possèdent la symétrie axiale par rapport à l'axe Oz et qui sont telles que la condition (2.46) soit satisfaite (i.e. en pratique $\langle \mathbf{A}|\tilde{\mathbf{B}}\rangle \neq 0$). On rappelle que la matrice \mathbf{d} carrée de taille N est définie par :

$$d_{kl} = \langle \phi_k | \psi_l \rangle \quad (\text{C.14})$$

où les états $|\phi_k\rangle, |\psi_l\rangle$ sont des états occupés respectivement dans $|\mathbf{A}\rangle$ et $|\tilde{\mathbf{B}}\rangle$. Grâce à la propriété de symétrie par renversement du sens du temps, on peut réduire le calcul du noyau de recouvrement $\langle \mathbf{A} | \tilde{\mathbf{B}} \rangle$ et $(\tilde{d}^{-1})_{kl}$ (2.93) à celui de matrices de dimensions $N/2 \times N/2$ en introduisant la sous-matrice E :

$$E_{ij} = \langle \phi_i | \psi_j \rangle \quad (\text{C.15})$$

pour des états i et j positifs, de telle sorte que sa conjuguée E^* corresponde à la matrice $\langle \bar{\phi}_i | \bar{\psi}_j \rangle$ où on a défini

$$|\bar{\phi}_i\rangle = \hat{T}|\phi_i\rangle, \quad |\bar{\psi}_j\rangle = \hat{T}|\psi_j\rangle \quad (\text{C.16})$$

Tout d'abord nous allons montrer que $d_{\bar{k}l} = \langle \bar{\phi}_k | \psi_l \rangle = 0$. En effet

$$\hat{T}\hat{j}_z\hat{T} = -\hat{j}_z \quad (\text{C.17})$$

donc

$$\langle \bar{k} | \hat{j}_z | \bar{k} \rangle = -\langle k | \hat{j}_z | k \rangle \quad (\text{C.18})$$

Puisque les états $|k\rangle$ et $|l\rangle$ sont des états "positifs" il en résulte que $|\bar{k}\rangle$ et $|\bar{l}\rangle$ ont des valeurs différentes de la valeur moyenne de \hat{j}_z puisque ces valeurs (nécessairement non nulles) ont des signes différents. Leur recouvrement est donc nul puisqu'à cause de l'hypothèse de symétrie axiale ces états sont états propres de \hat{j}_z (avec des valeurs propres différentes comme on vient de le voir). On peut réécrire alors la matrice \mathbf{d} sous la forme :

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E^* \end{pmatrix} \quad (\text{C.19})$$

on en déduit

$$\det \mathbf{d} = |\det E|^2 \quad (\text{C.20})$$

Comme autre conséquence de la symétrie axiale imposée, la matrice E pourra s'écrire sous la forme diagonale par blocs définis par le nombre quantique Ω (cf. la Figure A3.1) avec

$$\begin{aligned} E_{ij}(\Omega) &= \langle \phi_i | \psi_j \rangle \\ &= \sum_{\sigma} \sum_{n_z n_r} C_{\alpha}^{(i)} C_{\alpha}^{(j)} (-)^{n_z + \Lambda^{\sigma}} \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

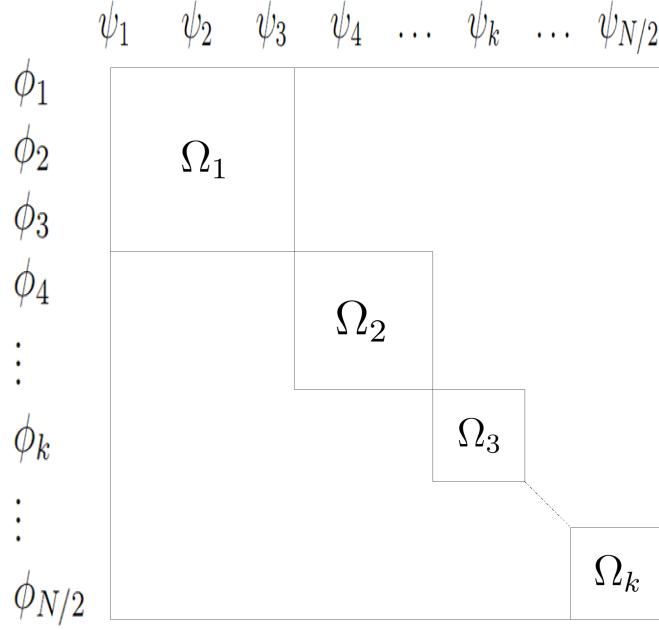


FIGURE A3.1 – Matrice E diagonale par blocs Ω_k

En conséquence, on déduit de la réalité de la décomposition des $|\phi_i\rangle$ sur la B.O.H.S.A que la matrice E (ou la matrice \mathbf{d}) est réelle.

Dans le cas limite il y a deux possibilités, soit $\mathbf{B} \equiv \mathbf{A}$, soit $\mathbf{B} \neq \mathbf{A}$. Si $\mathbf{B} \equiv \mathbf{A}$, comme $|\phi_i\rangle$ et $|\psi_j\rangle$ sont les vecteurs propres de l'opérateur de parité $\hat{\pi}$, on a :

$$E_{ij} = \pi_i \delta_{ij} \quad (\text{C.22})$$

La matrice E est donc inversible et

$$(E^{-1})_{ij} = \pi_i \delta_{ij} \quad \text{car} \quad \pi_i = \pi_i^{-1} \quad (\text{C.23})$$

+ Si $\mathbf{B} \neq \mathbf{A}$, la matrice E est singulière. On ne pourra pas utiliser le formalisme de la densité mixte.

Table des figures

1.1	La résolution des équations de Hartree-Fock	14
1.2	Le vide $ \Phi_0\rangle$	32
1.3	Quelques exemples d'excitations $ npnh\rangle$	36
1.4	Matrice de diagonalisation	42
1.5	Calcul HTDA auto-cohérent	44
2.1	Mineur d'ordre un $D_{\Phi\Psi}(k l)$	49
2.2	Schéma illustrant nos calculs d'éléments de matrice	54
2.3	Recouvrement $\langle \mathbf{A} \tilde{\mathbf{B}}\rangle \neq 0$ où $ \mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y \mathbf{A}\rangle$	56
2.4	Recouvrement $\langle \mathbf{A} \tilde{\mathbf{B}}\rangle = 0$ où $ \mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_y \mathbf{A}\rangle$	56
2.5	Recouvrement $\langle \mathbf{A} \tilde{\mathbf{B}}\rangle \neq 0$ où $ \mathbf{B}\rangle = a_{y'}^\dagger a_z^\dagger a_y a_z \mathbf{A}\rangle$	57
2.6	Matrice \mathbf{d} non – diagonale	59
3.1	Deux types de diffusion d'une paire $ \Phi_2\rangle$	72
3.2	Etat $ \Phi_2^{(l)}\rangle$ différant de $ \Phi_2^{(k)}\rangle$ par deux paires	88
3.3	Couples d'états d'excitation d'une paire à partir d'un même état de trou (i, \bar{i}) vers deux états différents de particule (i', \bar{i}') et (i'', \bar{i}'')	89
3.4	Couples d'états d'excitation à partir de deux états différents de trou (i', \bar{i}') et (i'', \bar{i}'') vers un même état de particule (i, \bar{i})	90
4.1	Propriétés de déformation octupolaire de ^{194}Pb à l'état fondamental étudiées par la méthode HTDA(δ) avec les deux forces SIII (c) et SkM* (d). Les courbes en trait plein correspondent aux énergies (HF+BCS ou HTDA) en fonction du moment octupolaire q_3 . Les courbes en pointillés correspondent aux énergies pro- jetées sur la parité moins et celles en tirets correspondent aux énergies projetées sur la parité plus.	98
4.2	Recouvrement $\langle \Psi \tilde{\Psi}\rangle$ pour l'état fondamental de ^{194}Pb	99
4.3	Notations employées	100
4.4	Propriétés de déformation octupolaire de ^{194}Pb à l'état fondamental (a) (où $q_2 = 0$ b) étudiées par P. Bonche <i>et al.</i> avec la méthode HF(SkM*)+BCS(G), cf. référence [76]. La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HF+BCS en fonction du moment octupolaire q_3 . La courbe en longs tirets et points (tirets) est l'énergie projetée sur la parité plus (moins) à déformation octupolaire fixée. .	101

4.5	Propriétés de déformation octupolaire de l'état superdéformé de ^{194}Pb étudiées par la méthode HTDA(δ) avec les forces Skyrme SIII (c) et SkM* (d). La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HTDA en fonction du moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie projetée sur la parité moins et en tirets sur la parité plus.	103
4.6	Propriétés de déformation octupolaire de ^{194}Pb à l'état superdéformé ($q_2 = 46\text{b}$) étudiées avec la méthode HF(SkM*)+BCS(G) (Figure établie à partir de la référence [76]).	104
4.7	Propriétés de déformation octupolaire de ^{222}Ra à l'état fondamental étudiées par la méthode HTDA(δ) avec deux force de SIII (c) et de la force SkM* (d). La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HTDA en fonction de moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie de la solution projetée sur la parité moins et celle en tirets correspond à la parité plus.	106
4.8	Courbe d'énergie de déformation de ^{240}Pu dans le formalisme HF(SkM*)+BCS(G) tirée de la référence [89]. La courbe en pointillés correspond à un calcul triaxial (à la première barrière). L'effet de la déformation asymétrique (à la seconde barrière) est indiqué par la courbe en tirets. La courbe en trait plein correspond au calcul symétrique.	107
4.9	Propriétés de la déformation octupolaire du ^{240}Pu à $q_2 = 105\text{b}$ étudiées par la méthode HTDA(δ) avec la force SIII (c) et la force SkM* (d). La courbe en trait plein correspond à l'énergie de HTDA en fonction du moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie de la solution projetée sur la parité moins et celle en tirets correspond à la parité plus.	109
4.10	Propriétés de la déformation octupolaire du ^{240}Pu à $q_2 = 130\text{b}$ étudiées par la méthode HTDA(δ) avec la force SIII (c) et la force SkM* (d). La courbe en trait plein correspondant à l'énergie de HTDA en fonction de moment octupolaire q_3 . La courbe en pointillés est l'énergie de la solution projetée sur la parité moins et en tirets correspondant à la parité plus.	110
A3.1	Matrice E diagonale par blocs Ω_k	126

Liste des tableaux

1.1	Quelques paramétrisations de l'interaction effective phénoménologique de Skyrme	17
1.2	Expression des coefficients B_i	19
3.1	Contributions de différents termes de la somme (3.31) à l'élément de matrice $\langle \Psi \hat{H} - C \hat{1} \tilde{\Psi} \rangle$ pour le ^{222}Ra calculé avec l'interaction SIII pour $q_2 = 13\text{b}$ et $q_3 = 20\text{fm}^3$. On notera que $C=1828.3\text{MeV}$.	76
4.1	Paramètres des interactions résiduelles pour les calculs HF+BCS et HTDA	96
4.2	Propriétés de déformation obtenues dans nos calculs comparées à celles de P. Bonche <i>et al.</i> [76] pour l'état fondamental de ^{194}Pb .	102
4.3	Propriétés de déformation obtenues dans nos calculs comparées à celles de P. Bonche <i>et al.</i> [76] pour l'état superdéformé de ^{194}Pb	104

Bibliographie

- [1] J.-P. Delaroche et al., *Phys. Rev.*, C81, 2010.
- [2] D. C. Zheng, D. W. L. Sprung and H. Flocard, *Phys. Rev.*, C46 :1355, 1992.
- [3] N. Pillet. *PhD thesis, Université Bordeaux I*, 2000.
- [4] T. L. Ha. *PhD thesis, Université Bordeaux I*, 2004.
- [5] K. Sieja. PhD thesis cosponsored by the Marie Curie-Sklodowska, Poland University and the Université Bordeaux I, 2007.
- [6] H. Naïdja. *PhD thesis, Université Bordeaux I*, 2009.
- [7] D. Vautherin and D. M. Brink, *Phys. Rev.*, C5 :626, 1972.
- [8] D. Vautherin. *Phys. Rev.*, C7 :296, 1973.
- [9] C. F. von Weizsäcker. *Z. Phys*, 96 :431, 1935.
- [10] G. Bertsch. *Z. Phys* A289 :103, 1978.
- [11] S. G. Nilsson. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 29 :no 16, 1955.
- [12] R. D. Woods and D. S. Saxon. *Phys. Rev.*, 95 :577-578, 1954.
- [13] D. R. Hartree. *Proc. Cam. Phil. Soc.*, 24 :89, 1928.
- [14] V. A. Fock. *Zeit. Phys. Rev.*, 61 :89, 1930.
- [15] I. Kelson. *Phys. Rev.*, 132 :2189, 1963.
- [16] M. A. Preston and R. K. Bhaduri. *Structure of the Nucleus*. Addison-Wesley publishing company, 1975.
- [17] K. A. Brueckner. *Phys. Rev.*, 97 :1353, 1955.
- [18] K. A. Brueckner, J.L. Gammel, and H. Weitzner. *Phys. Rev.*, A238 :551, 1957.
- [19] P. Ring and P. Schuck. *The nuclear many-body problem*. SpringerVerlag, Berlin, 1980.
- [20] T. H. R. Skyrme, *Nucl. Phys.*, 9 :615, 1959.
- [21] M. Beiner, H. Flocard, N. Van Giai, and P. Quentin. *Nucl.Phys.*, A238 :29, 1975.
- [22] H. Krivine, J. Treiner, and O. Bohigas. *Nucl.Phys.*, A336 :155, 1980.
- [23] J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, and H. B. Hakansson. *Nucl.Phys.*, A386 :79, 1982.
- [24] L. Bonneau. *PhD thesis, Université Bordeaux I*, 2003.
- [25] N. Van Giai and H. Sagawa, *Phys. Lett.*, 106B :379, 1981.
- [26] J. Dobaczewski, H. Flocard, and J. Treiner. *Nucl.Phys.*, A422 :103, 1984.
- [27] E. Chabanat et al. *Phys.Scripta*, T56 :231, 1994.

- [28] C. Titin-Schnaider and P. Quentin. *Phys. Lett. B*, 39 :397, 1974.
- [29] A. Bohr, B. Mottelson and D. Pines. *Phys.Rev.*,110 :936, 1958.
- [30] J. Bardeen, L. N. Cooper, and Schrieffer J. R. *Phys. Rev.*, 108 :1175, 1957.
- [31] T. H. R. Skyrme, *Phil. Mag.*, 1 :1043, 1956.
- [32] J. W. Negele, D. Vautherin, *Phys. Rev.*, C5 :1472, 1972.
- [33] A. K. Kerman, R. D. Lawson and M. H. Macfarlane, *Phys. Rev.*, 124 :162, 1961.
- [34] R. E. Peierls and J. Yoccoz. *Proc. Phys. Soc. (London)*, A70 :381, 1957.
- [35] H. D. Zeh. *Z. Phys.* 188 :361, 1965.
- [36] J. A. Sheikh and P. Ring. *Nucl. Phys.*, A665 :71, 2000.
- [37] M. Anguiano, J. L. Egido, and L. M. Robledo. *Nucl. Phys.*, A696 :71, 2001.
- [38] H. J. Lipkin. *Ann. Phys.(N.Y.)*, 9 :272, 1960.
- [39] Y. Nogami. *Phys. Rev.*, B313 :134, 1964.
- [40] H. C. Pradhan, Y. Nogami and J. Law. *Nucl. Phys.*, A201 :357, 1973.
- [41] N. Pillet, P. Quentin and J. Libert. *Nucl.Phys.*, A697 :141-163, 2002.
- [42] P. Quentin et al. *Nucl. Phys.*, A734 :477, 2004.
- [43] L. Bonneau, P. Quentin and K. Sieja, *Phys. Rev.*, C76, 014304, 2007.
- [44] L. Bonneau, J. Le Bloas, P. Quentin, J. Bartel, D. Strottman, *Int.J.Mod.Phys.* E18 :951, 2009.
- [45] G. F. Bertsh, M. Girod, S. Hilaire, J. -P. Delaroche, H. Goutte and S. Péru. *Phys. Rev. Lett.*, 032502, 2007.
- [46] S. J. Krieger, P. Bonche, H. Flocard, P. Quentin, and M. S. Weiss. *Nucl.Phys.*, A517 :275, 1990.
- [47] Cf. par exemple : A. M. Lane, *Nuclear Theory, pairing force correlations and collective motion*, Benjamin, New York, 1964.
- [48] B. N. Parlett and D. S. Scott. *Math.Comp.*, 33(145) :217, 1979.
- [49] P. O. Löwdin, *Phys. Rev.*, 97 :1474-1489, 1955.
- [50] P. O. Löwdin, *Phys. Rev.*, 97 :1490-1508, 1955.
- [51] R. Balian and E. Brezin. *Nuovo Cimento.*, 64B :37, 1969.
- [52] P. Quentin, *Thèse de doctorat d'état, Université Paris-Sud, Centre d'Orsay*, 1975.
- [53] J. Bartel and P. Quentin, *L'approximation de particules indépendantes du problème à N corps*, (ouvrage en cours de rédaction).
- [54] F. Asaro, Jr. F. Stephens, and I. Perlman, *Phys. Rev.*, 92, 1953.
- [55] P. Möller and S. G. Nilsson, *Phys. Lett. B.*, 31 :283, 1970.

- [56] G. A. Leander et al. *Nucl.Phys.*, A388 :452, 1982.
- [57] W. Nazarewicz et al. *Nucl.Phys.*, A429 :269, 1984.
- [58] I. Ahmad and P. A. Butler, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* 43, 1993.
- [59] P. A. Butler and W. Nazarewicz, *Rev. Mod. Phys.* 68 :349, 1996.
- [60] M. Brack and P. Quentin, *Nucl. Phys.*, A361 :31, 1981.
- [61] I. Kelson, *Phys. Lett.*, 16 :143, 1965.
- [62] H. J. Krappe and H. G. Wahsweiler, *Nucl. Phys.*, A104 :633, 1967.
- [63] B. Giraud and P. U. Sauer, *Nucl. Phys.*, A154 :587, 1970.
- [64] P. Bonche, P.-H. Heenen, H. Flocard and D. Vautherin, *Phys. Lett.*, B175 :387, 1986.
- [65] J. L. Egido and L. M. Robledo, *Nucl. Phys.*, A524 :65-87, 1991.
- [66] E. Garrote, J. L. Egido and L. M. Robledo, *Phys. Rev.*, 80, 1998.
- [67] J. Skalski, P.-H. Heenen and P. Bonche, *Nucl. Phys.*, A559 :221, 1993.
- [68] J. L. Egido and L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* A545 :589, 1992.
- [69] J. L. Egido and L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* A518 :475, 1990.
- [70] J. Skalski, *Phys. Rev.*, C63, 024312., 2001.
- [71] M. Anguiano, J. L. Egido and L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* A683 :227, 2001.
- [72] P.-H. Heenen, J. Skalski, P. Bonche and H. Flocard, *Phys. Rev.*, C50 :802, 1994.
- [73] V. Martin and L. M. Robledo, *Phys. Rev.*, C48 :188, 1993.
- [74] L. M. Robledo, J. L. Egido, J. F. Berger and M. Girod, *Phys. Lett. B.*, 187 :223, 1987.
- [75] J. L. Egido and L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* A494 :85, 1989.
- [76] P. Bonche, S. J. Krieger, M. S. Weiss, J. Dobaczewski, H. Flocard and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. Lett.* 66 :876, 1991.
- [77] L. Bonneau, P. Quentin and P. Möller, *Phys. Rev.*, C76, 024320, 2007.
- [78] <http://www.nndc.bnl.gov/nsr/>
- [79] J. Meyer, P. Bonche, M. S. Weiss, J. Dobaczewski, H. Flocard and P.-H. Heenen, *Nucl. Phys.* A588 :597, 1995.
- [80] K. Theine et al, *Z. Phys.*, A336 :113, 1990.
- [81] H. Hübel et al., *Nucl. Phys.*, A520 :125c, 1990.
- [82] F. Asaro, Jr. F. Stephens and I. Perlman, *Phys. Rev.*, 92 :1495, 1953.
- [83] P. Vogel, *Nucl. Phys.* A112 :583, 1968.
- [84] V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys.* A95 :420, 1967. :122, 1968.
- [85] M. Brack and P. Quentin, *Nucl. Phys.* A361 :31, 1981.

- [86] H. Flocard, P. Quentin, D. Vautherin, M. Vénéroni and A. K. Kerman, *Nucl. Phys.* A231 :176, 1974.
- [87] D. Kolb, R. Y. Cusson and H. W. Schmitt, *Phys. Rev.* C10 :1529, 1974.
- [88] J. F. Berger, M. Girod and D. Gogny, *Nucl. Phys.*, A502 :85c-104c, 1989.
- [89] L. Bonneau, P. Quentin and D. Samsøen, *Eur. Phys. J.* A21 :391-406, 2004.
- [90] B. Singh, R. B. Firestone and S. Y. Frank Chu, *Nucl. Data Sheets* 78, 1 .1996.
- [91] Xiao-Ling Han and Cheng-Li Wu, *At. Data Nucl. Data Tables* 73, 43. 1999.
- [92] J. Damgaard, H. C. Pauli, V. V. Paskhevich and V. M. Strutinsky. *Nucl. Phys.*, A135 :432-444, 1969.
- [93] P. Quentin and R. Babinet, *Nucl. Phys.*, A156 :365, 1970.

Résumé

Nous nous sommes intéressés à la restauration de la symétrie de réflexion droite-gauche brisée dans certains calculs effectués en utilisant l'approche HTDA (Higher Tamm-Dancoff Approximation). Cette approche a été proposée par le groupe de Bordeaux pour traiter de façon microscopique les corrélations en conservant explicitement les nombres de nucléons. La projection sur la parité par la méthode PAV (projection après variation) utilisant une généralisation du théorème de Wick de type Löwdin s'est avérée être très bien adaptée dans le cadre d'un modèle simplifié pour ce type de calcul et a permis de tourner certaines difficultés propres aux calculs qui utilisent la théorie de la fonctionnelle de la densité déduite par exemple de l'interaction de Skyrme. Les résultats obtenus pour des noyaux lourds manifestant une déformation octupolaire ou à tout le moins une grande déformabilité pour ce mode, sont en gros tout à fait cohérents avec les calculs antérieurs effectués dans une approche HFB ou HF+BCS. D'autre part nos résultats montrent qu'on peut abaisser par projection sur la parité positive la hauteur de la seconde barrière de fission par une quantité de l'ordre de 1 MeV.

Mots-clés : restauration de la symétrie de réflexion droite-gauche, méthode HTDA, conservation du nombre de particules, corrélations, approches microscopiques, généralisation du théorème de Wick, seconde barrière de fission, déformations octupolaires.

Abstract

This thesis has been concerned with the restoration of the left-right symmetry broken in some instances. This has been achieved in the framework of the Higher Tamm-Dancoff Approximation (HTDA) proposed by the Bordeaux group to treat correlations in an explicitly particle-number conserving microscopic approach. The parity-projected calculations performed within a PAV (projection after variation) method using a generalized Wick's theorem due to Löwdin has appeared to be a very well-suited frame. It has been implemented within a simple model approach. This has been proposed to clear out some difficulties appearing when one uses an Energy Density Functional approach with an energy density functional issued from an underlying Skyrme interaction. As a result we obtain a fairly good global agreement of our results with previous ones issuing from an HFB approach or its HF+BCS limit, for some heavy nuclei exhibiting a stable octupole deformation or at least a remarkable smoothness for this collective mode. As another result, we have shown that the projection on a positive parity solution is able to reduce the second fission barrier height by about 1 MeV.

Keywords : restoration of the left-right symmetry, the HTDA method, particle number conservation, correlations, microscopic approaches, generalized Wick's theorem, second fission barrier, octupole deformations.